量子三体问题*

马中骐
(中国科学院高能物理研究所,北京 100039)

摘要 提出一种处理量子三体问题的方案，它能把质心平动自由度和系统转动自由度完全地与内部自由度分离开来，从而把三体问题的 Schrödinger 方程简化为只依赖于3个内部变量的联立偏微分方程组．对于任意给定的总轨道角动量 l 和宇称 $(-1)^{l+\lambda}(\lambda=0$ 或 $1)$，这方程组包含的方程数目是 $l+1-\lambda$ 个．进一步可以把波函数按一组正交完备的函数基展开，以二体 Coulomb 作用为例，具体导出了波函数展开级数中的系数所满足的联立线性代数方程组．所有的推导都没有引进任何近似，计算误差主要来自数值计算中无穷级数的截断．

关键词 量子三体问题 Schrödinger 方程 转动自由度的分离

早在 1935 年，Zernike 和 Brinkman 就引入超球谐函数方法处理量子三体问题，以后 Delves[1,2]和 Smith[3,4]发展了这一方法，并用来研究原子和核理论中的三体问题．近 20 年来，超球谐函数方法已成为研究少体问题的最重要工具之一[5,6]．对 N 体系统，用 Jacobi 坐标的方法分离质心的平动自由度后，Schrödinger 方程包含 $3N-3$ 个变量，超球谐函数方法把这些变量分为长度量纲的超半径 ρ 和无量纲的 $3N-4$ 个超角变量，后者统称为 Ω．由于角变量的周期性质，波函数可分解为关于正交函数基的离散和，这函数基称为超球谐函数 $\mathscr{Y}_{\kappa\mu}(\Omega)$，

$$\Psi(\rho,\ \Omega)=\sum_{\kappa\mu}\phi_{\kappa\mu}(\rho)\mathscr{Y}_{\kappa\mu}(\Omega),$$

于是 Schrödinger 方程简化为关于超半径 ρ 的无穷联立常微分方程组

$$\left\{T_{\rho}+\frac{\kappa}{\rho^{2}}-E\right\}\phi_{\kappa\mu}(\rho)=-\sum_{\kappa'\nu}\langle\mathscr{Y}_{\kappa\mu}(\Omega)\mid V\mid\mathscr{Y}_{\kappa'\nu}(\Omega)\rangle\phi_{\kappa'\nu}(\rho),$$

$$\Lambda^{2}\mathscr{Y}_{\kappa\mu}(\Omega)=\kappa\mathscr{Y}_{\kappa\mu}(\Omega),$$

其中 κ 是所谓广义角动量算符 Λ^2的本征值，Λ^2依赖于所有 $3N-4$ 个角变量 Ω，μ 是可能有的其他量子数，例如分角动量量子数．

从评述文章[5~7]所列举的大量文献中可以看到，超球谐函数方法已经被广泛用来研究分子、原子和核的性质．特别对双电子原子系统(例如氦原子)，能级的实验测量精度已经达到9位有效数字[8~12]，同时在引进成百上千个变分参数后，变分法对能级的计算精度也宣称可以达到12位有效数字(见文献[13])，但人们仍有许多理由更倾向于直接求解三体问题的

1999-11-16 收稿,2000-03-02 收修改稿
* 国家科学技术委员会"攀登"计划、国家自然科学基金(批准号: 19947002)和中国科学院基金(LWTZ-1298)资助项目

Schrödinger 方程，理由之一就是变分法所选用的变分函数的结构有很大的任意性，特别是在对变分能量贡献比较小的空间区域．人们很早就认识到，简单的超球谐函数方法精度较差，因此近年的努力集中在如何改进级数的收敛性，克服简单超球谐函数方法的固有缺点，使计算精度达到可与变分法相比拟的程度．例如使用关连函数的超球谐函数方法[14~20]，把波函数分解为两部分的乘积，其中一部分集中反映势函数的尖角，粒子的成团或远离的特征，以加快作为另一部分的超球谐函数展开式的收敛性．超球谐坐标方法[21~25]引入超球谐分道函数(hyperspherical channel functions)，在超球谐紧耦合方程的数值积分计算中应用 diabatic-by-sector 方法．在势超球谐方法[26]中用选择优化态子集的方法以减少超球谐函数的简并性．在 Fock 展开法[27]中引入对 ρ 和 $\ln\rho$ 的双重求和，并把 Fock 级数解的组合在衔接半径处与关于超球谐函数的级数解相衔接．复坐标转动法[28,29]和 R-矩阵法[30]被用来计算氦原子双激发 P 波共振态和极化效应．Wannier 阈理论[31]被应用到双电子系统的 P 波和 D 波态的计算．还有运用高维空间转动方法处理少体问题[32]等．

在文献中还可以找到更多的改进方案．但是，在本文中我们关心的是涉及超球谐函数方法的一个基本问题的改进，就是如何把转动自由度完全地与内部自由度分离的问题．对量子三体问题来说，分离了质心平动自由度后，存在两个 Jacobi 坐标矢量，一个矢量 $\boldsymbol{x} = (r_x, \theta_x, \varphi_x)$描写第 1 个粒子相对其他两个粒子质心的运动，另一个矢量 $\boldsymbol{y} = (r_y, \theta_y, \varphi_y)$描写后两个粒子间的相对运动．对氦原子来说，也有些作者[22~24]假定氦核的质量是无穷大，直接用两个电子的坐标矢量代替 Jacobi 坐标矢量．超球谐函数方法又把这 6 个变量分为超半径 ρ 和超角变量 Ω．简略地说，在已发表的有关超球谐函数方法的文章中，大致有两种定义超角变量的方案，一种[16,27~29,32]是选择角度 θ_x，φ_x，θ_y，φ_y和 $\omega = \arctan(r_y/r_x)$，另一种[18,19,31]则选 ω，$\theta = \arccos[\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{y}/(r_x r_y)]$，和 3 个描写系统转动的 Euler 角 α，β，γ．在第 1 种方案中，转动自由度明显地与内部自由度混在一起处理，人们不得不面对同时包含 5 个角变量的复杂计算，而在第 2 种方案中，对任意角动量情况的普遍有效的处理方法还没有找到[5,33]，仅解决了处理 $l=0$[7]和 $l=1$[18,19]情况的方法．显然，在任何一种使用改进的超球谐函数方法的实际计算中，人们必须首先计算广义角动量算符 Λ^2的本征函数，即超球谐函数．就我们所知，在大多数的文献中，广义角动量算符 Λ^2和超球谐函数都依赖于全部 5 个超角变量(或在 N 体问题中依赖于 $3N-4$ 个超角变量)．既然三体问题的相互作用并不具有超球对称性，通常只具有普通的三维空间转动不变性，这就使得势函数矩阵元的计算不得不在大量不同的超球谐函数态间进行[7]．换句话说，分别与两个 Jacobi 坐标相联系的分角动量并不守恒，为了组合成给定的总轨道角动量态，在现有的超球谐函数方法中，具有不同分角动量的无穷多个超球谐函数原则上都会有贡献，这造成了超球谐函数态的不必要的简并．

项武德和项武义教授在最近的一篇文章1)中提出了两条未给证明的定理，可以把转动自由度和内部自由度完全分开，并对 S 波情况，把波函数按正交函数基展开为三重无穷级数，把三体问题的 Schrödinger 方程简化为无穷联立线性代数方程组．尽管还有些实际计算问题尚未解决(例如方程中出现的许多系数表达为一个无穷级数和两个交错级数乘积的积分，计算

1) Hsiang W T, Hsiang W Y. On the reduction of the Schrödinger's equation of three-body problem to a system of linear algebraic equations

很困难，而且还有级数的收敛问题没有讨论），但此方法不失为研究三体问题的一个好的出发点.

本文试图发展和完成这一方法，用物理上常用的数学工具，简单明了地证明两类自由度的分离问题. 基本方法是把波函数分解为角动量本征函数和仅依赖于3个内部变量的波函数(本文称之为径向波函数)的乘积，由于分角动量不守恒，实际波函数是这样的乘积之和. 对于任意给定的总轨道角动量 l 和宇称 $(-1)^{l+\lambda}(\lambda=0$ 或 $1)$，我们证明，仅有 $l+1-\lambda$ 个分角动量态在组合成总角动量本征函数中实际起作用,而其余的无穷多个分角动量态的贡献可归结到径向波函数的贡献中去. 因此,对于任意给定的总轨道角动量和宇称，三体问题的 Schrödinger 方程简化为关于有限个仅依赖于3个内部变量的径向波函数的联立偏微分方程组.

然后,借用在超球谐函数方法中仅适用于 S 波$(l=0)$[7]的复坐标矢量方法，把内部变量分为超半径 ρ 和两个角变量 α 与 β, Laplace 算符也分解为超半径部分和所谓广义角动量 Λ^2 部分. 这里的 Λ^2 与超球谐函数方法中的广义角动量有两点本质的不同，一是这里的 Λ^2 仅依赖于两个内部变量 α 和 β，而不是5个超角变量 Ω，二是这里的公式适用于任何总轨道角动量的情况，而不仅限于 S 波. 另一方面，这里的 Λ^2 又与超球谐函数方法中关于 S 波的广义角动量算符形式有些相像，那里的计算方法可以借鉴. Λ^2 的本征函数形式与球谐函数很相似，把径向波函数按此正交归一的完备本征函数展开后，得到关于超半径 ρ 的联立常微分方程组. 与超球谐函数方法不同的是，这里得到的关于超半径 ρ 的联立常微分方程组中，各方程所包含的与 ρ 有关的部分完全相同，从而可通过谱分解方法，把这联立常微分方程组简化为联立线性代数方程组. 因为二体作用的势函数只是内部变量的函数，它在此本征函数基中的矩阵元可以具体计算出来. 以 Coulomb 作用为例，势函数在此本征函数基中的矩阵元可以表达成一个无穷级数的积分，它在积分区域内不是一致收敛的，其物理原因是当两个粒子重合时 Coulomb 势发散. 此奇点在积分区域的边界上，把奇点挖掉，级数是一致收敛的，可以逐项积分. 我们证明了，积分后的无穷级数，包括奇点在内，是一致收敛的，可以逐项求极限，最后得到收敛的正项级数，容易进行数值计算.

归纳起来，本文的创新点在于如下方面：

(i) 把三体问题的质心平动自由度和系统转动自由度完全地与内部自由度分离开来，对于任意给定的总轨道角动量 l 和宇称 $(-1)^{l+\lambda}$，我们证明了，仅有 $l+1-\lambda$ 个分角动量态在组合成总角动量本征函数中实际起作用，而其余的无穷多个分角动量态的贡献可归结到径向波函数的贡献中去，从而把三体问题的 Schrödinger 方程简化为仅含3个内部变量的个数有限的联立偏微分方程组. 此偏微分方程组与项武德等人[1)]给出的相符，但本文用简单易懂的方法加以证明，并讨论了它的物理意义.

(ii) 改进了项武德等人[1)]的方法，把径向波函数按一组正交归一的完备函数基展开，对任意给定的总轨道角动量和宇称，具体计算出展开系数满足的联立线性代数方程组. 虽然此函数基的一部分在形式上与超球谐函数方法关于 S 波给出的函数基相类似，但在那里此函数基不适用于非零角动量的情况.

---

1) 见747页脚注1)

（ⅲ）以二体 Coulomb 作用为例，具体把势函数在此函数基中的矩阵元，通过严格的数学论证，表达成收敛的无穷正项级数，从而大大简化了本方法的数值计算.

1　质心平动自由度的分离

对 N 个粒子的体系，用 $\boldsymbol{r}_j$ 和 $M_j(j=1, 2, \cdots, N)$分别表示 N 个粒子的坐标矢量和质量，$M=\sum M_j$为系统的总质量，$m_j = M_j/M$ 是各粒子的相对质量，$\sum m_j = 1$. N 个粒子体系的 Schrödinger 方程为

$$-(\hbar^2/2M)\Delta\Psi + V\Psi = E\Psi, \tag{1}$$

$$\Delta = \sum_{j=1}^{N} m_j^{-1}\Delta_{\boldsymbol{r}_j}, \tag{2}$$

其中 $\Delta_{\boldsymbol{r}_j}$是关于各粒子坐标矢量 $\boldsymbol{r}_j$ 的 Laplace 算符. V 是二体作用势，它只依赖于每一对粒子的距离. 为确定起见，我们讨论 Coulomb 相互作用，势为

$$V = \sum_{j=2}^{N}\sum_{i=1}^{j-1} \frac{Z_i Z_j e^2}{|\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j|}, \tag{3}$$

其中 $Z_j e$ 是第 j 个粒子的电荷.

把粒子的坐标矢量 $\boldsymbol{r}_j$ 换成 N 个 Jacobi 坐标矢量 $\boldsymbol{R}_k$：

$$\boldsymbol{R}_0 = \sum_{j=1}^{N} m_j \boldsymbol{r}_j,$$

$$\boldsymbol{R}_k = \left(\frac{m_k W_{k+1}}{W_k}\right)^{1/2}\left(\boldsymbol{r}_k - \sum_{j=k+1}^{N} m_j \boldsymbol{r}_j / W_{k+1}\right),\ 1 \leqslant k \leqslant N-1,\ W_k = \sum_{j=k}^{N} m_j,\ W_1 = 1, \tag{4}$$

其中 $\boldsymbol{R}_0$ 描写质心的运动，$\boldsymbol{R}_1$ 描写第 1 个粒子相对其余粒子质心的运动，$\boldsymbol{R}_2$ 描写第 2 个粒子相对后 $N-2$ 个粒子质心的运动，以此类推. $\boldsymbol{R}_k$ 前面的质量权重系数由条件 $\sum_{j=1}^{N} m_j \boldsymbol{r}_j^2 = \sum_{k=0}^{N-1} \boldsymbol{R}_k^2$ 决定. 具体说，可在质心系中，取前 $k-1$ 个粒子与质心重合，后 $N-k$ 个粒子互相重合，由下式定出 $\boldsymbol{R}_k$ 的系数：

$$\boldsymbol{r}_{k+1} = \boldsymbol{r}_{k+2} = \cdots = \boldsymbol{r}_N = -m_k \boldsymbol{r}_k / W_{k+1},\quad \sum_{j=k}^{N} m_j \boldsymbol{r}_j^2 = \boldsymbol{R}_k^2. \tag{5}$$

通过直接的变量替换，容易证明 Laplace 算符 Δ 和系统总轨道角动量算符 L 可直接用 Jacobi坐标表出：

$$\Delta = \sum_{j=1}^{N} m_j^{-1}\Delta_{\boldsymbol{r}_j} = \sum_{k=0}^{N-1}\Delta_{\boldsymbol{R}_j},$$

$$\boldsymbol{L} = -\mathrm{i}\hbar\sum_{j=1}^{N}\boldsymbol{r}_j \times \nabla_{\boldsymbol{r}_j} = -\mathrm{i}\hbar\sum_{k=0}^{N-1}\boldsymbol{R}_j \times \nabla_{\boldsymbol{R}_j}, \tag{6}$$

在质心系中，$\boldsymbol{R}_0 = 0$，Jacobi 坐标矢量 $\boldsymbol{R}_k$ 的 $3(N-1)$个分量在(6)式给出的 Laplace 算符中地位平等，因此 Laplace 算符具有 $O(3N-3)$ 群对称性，通常的三维空间的转动反演群 $O(3)$ 和 N 个粒子的置换群都是此 $O(3N-3)$ 群的子群. 对三体问题，把 $\boldsymbol{R}_1$ 和 $\boldsymbol{R}_2$ 分别记作 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{y}$，在质心系中有

$$\boldsymbol{x}=\left(\frac{m_1}{m_2+m_3}\right)^{1/2}\boldsymbol{r}_1,\ \boldsymbol{y}=\left(\frac{m_2m_3}{m_2+m_3}\right)^{1/2}(\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_3),\tag{7}$$

$$\Delta=\Delta_x+\Delta_y,\ \boldsymbol{L}=\boldsymbol{L}_x+\boldsymbol{L}_y=-\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{x}\times\nabla_x-\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{y}\times\nabla_y.\tag{8}$$

三体问题的 Laplace 算符 Δ 具有 $O(6)$群对称性，其中包括空间转动群 $SO(3)$和关于两矢量 $\boldsymbol{x}$ 与 $\boldsymbol{y}$ 的正交变换群 $O(2)$，而作用势 V 只有 $O(3)$群对称性，在全同粒子情况还有置换群 S_3对称性．显然置换群 S_3是 $O(2)$群的子群，因为在后两个粒子对换时，$\boldsymbol{x}$ 保持不变，$\boldsymbol{y}$ 改变符号，而在前两个粒子对换时，

$$\begin{aligned}\boldsymbol{x}'&=\left(\frac{m_2}{m_1+m_3}\right)^{1/2}\boldsymbol{r}_2=-\boldsymbol{x}\cos\omega+\boldsymbol{y}\sin\omega,\\ \boldsymbol{y}'&=\left(\frac{m_1m_3}{m_1+m_3}\right)^{1/2}(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_3)=\boldsymbol{x}\sin\omega+\boldsymbol{y}\cos\omega,\\ \cos\omega&=\left(\frac{m_1m_2}{m_1m_2+m_3}\right)^{1/2},\quad \sin\omega=\left(\frac{m_3}{m_1m_2+m_3}\right)^{1/2}.\end{aligned}\tag{9}$$

对全同粒子体系，$\omega=\pi/3$.

2 转动自由度的分离

Schrödinger 方程(1)是球对称的，它的解可分解为角动量 $\boldsymbol{L}$ 的本征函数和仅依赖于内部变量 ξ_j的函数的乘积，

$$\xi_1=\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{x},\quad \xi_2=\boldsymbol{y}\cdot\boldsymbol{y},\quad \xi_3=\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{y}.\tag{10}$$

内部变量在转动中保持不变．本文把内部变量的函数称为“径向波函数”．

对单粒子在中心力场中的运动问题，角动量本征函数是球谐函数 $Y^l_m(\theta,\varphi)$．对量子三体问题，球谐函数应如何推广？一个自然的想法是引入 Euler 角，它描写系统从标准位置到现在位置的转动，正如 Wigner (见文献[34]p.214)所指出的，用 Euler 角表达的角动量本征函数正是 $SO(3)$群的表示矩阵 $D^l_{mm'}(\alpha,\beta,\gamma)$．可惜的是，由于 Euler 角的奇异性，除了 $l=0$[7]和 $l=1$[18, 19] 的情况外，分离转动自由度的一般方法还没有找到[5, 33]．另一种推广方案[16, 22~24, 27~29, 32]是直接选择依赖于 5 个超角变量的超球谐函数，转动自由度和内部自由度混在一起．由于分角动量不守恒，必须在无穷多个具有不同分角动量的超球谐函数间计算势函数的矩阵元．是否有必要面对如此多的分角动量态呢?

看来问题出在角变量的引入上．让我们从另一角度来研究球谐函数的性质．把球谐函数乘上 r^l，就得到球谐多项式 $\mathscr{Y}^l_m(\boldsymbol{x})\equiv r^lY^l_m(\theta,\varphi)$，其中 (r,θ,φ) 是坐标矢量 $\boldsymbol{x}$ 的球坐标分量．球谐多项式既是角动量的本征函数，又是 Laplace 方程的解，它是关于坐标矢量 $\boldsymbol{x}$ 分量的 l 次齐次多项式，且不明显包含 $r^2=\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{x}$ 因子．容易计算，关于 $\boldsymbol{x}$ 分量的 l 次齐次多项式，线性无关的共有 $N(l)$个，$N(l)=\sum\limits_{s=0}^{l}(l-s+1)=(l+1)(l+2)/2$. 除去明显包含 r^2因子的多项式，线性无关的 l 次齐次多项式还有 $N(l)-N(l-2)=2l+1$ 个，它正是角动量为 l 的球谐多项式 $\mathscr{Y}^l_m(\boldsymbol{x})$的个数．

现在讨论三体问题．我们要研究，在质心系中共有哪些关于两个 Jacobi 坐标矢量 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{y}$

分量的 l 次齐次多项式. 要求它们不明显包含 ξ_j 的函数作为因子，因为这类因子应该并入径向波函数. 显然，$\mathscr{Y}_m^q(\boldsymbol{x})\mathscr{Y}_{m'}^{l-q}(\boldsymbol{y})$ 是关于 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{y}$ 分量的 l 次齐次多项式，它们不明显包含因子 ξ_1 和 ξ_2，它们的个数是 $M(l)$：

$$M(l) = \sum_{q=0}^{l}(2q+1)(2l-2q+1) = (l+1)(2l^2+4l+3)/3.$$

在除去明显包含因子 ξ_3 的多项式后，线性无关的多项式个数是

$$M(l) - M(l-2) = 4l^2+2,\ l \geqslant 1. \tag{11}$$

根据角动量理论[35]，多项式 $\mathscr{Y}_m^q(\boldsymbol{x})\mathscr{Y}_{m'}^{l-q}(\boldsymbol{y})$ 可以用 Clebsch-Gordan 系数组合成总角动量 $\boldsymbol{L}$ 的本征函数：

$$\mathscr{Y}_{L\mu}^{lq}(\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{y}) = \sum_m \mathscr{Y}_m^q(\boldsymbol{x})\mathscr{Y}_{\mu-m}^{l-q}(\boldsymbol{y})\langle q,\ m,\ l-q,\ \mu-m|L,\ \mu\rangle. \tag{12}$$

把 Clebsch-Gordan 系数 $\langle q,m,l-q,\mu-m|L,\ \mu\rangle$ 的具体数值代入，可以发现 $L=l\ (0\leqslant q\leqslant l)$ 和 $L=l-1\ (1\leqslant q\leqslant l-1)$ 的本征函数确实不明显包含 ξ_j 的函数作为因子(见(13)式)，而这样的本征函数个数是

$$(2l+1)(l+1)+(2l-1)(l-1) = 4l^2+2,\ l \geqslant 1.$$

它恰好符合(11)式. 这就是说，余下的本征值为 $L<l-1$ 的本征函数都可表为低于 l 次的齐次多项式和径向函数乘积的组合. 例如 $l=2$ 次齐次多项式中，本征值为 $L=0$ 的多项式正比于 ξ_3. 反过来说，由两个 Jacobi 坐标矢量 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{y}$ 的分量构成的，总角动量平方 $\boldsymbol{L}^2$ 的本征值为 $l(l+1)$ 的本征函数，只能是上述 l 次或 $l+1$ 次齐次多项式的组合，组合系数是径向函数. 引入参数 $\lambda=0$ 或 1 来标记它们：

$$\mathscr{Y}_{l\mu}^{(l+\lambda)q}(\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{y}) = \sum_m \mathscr{Y}_m^q(\boldsymbol{x})\mathscr{Y}_{\mu-m}^{l-q+\lambda}(\boldsymbol{y})\langle q,m,l-q+\lambda,\mu-m|l,\ \mu\rangle,$$

$$\lambda = 0 \text{ 和 } 1,\ \lambda \leqslant q \leqslant l.$$

由于球对称的性质，在 $\boldsymbol{L}^2$ 的本征函数中，只需写出有最大 L_3 本征值的函数($\mu=l$)，即

$$\mathscr{Y}_{ll}^{lq}(\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{y}) = (-1)^l\left\{\frac{[(2q+1)!(2l-2q+1)!]^{1/2}}{q!(l-q)!2^{l+2}\pi}\right\}(x_1+\mathrm{i}x_2)^q(y_1+\mathrm{i}y_2)^{l-q},$$

$$\mathscr{Y}_{ll}^{(l+1)q}(\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{y}) = (-1)^l\left\{\frac{(2q+1)!(2l-2q+3)!}{2q(l-q+1)(l+1)}\right\}^{1/2}\{(q-1)!(l-q)!2^{l+2}\pi\}^{-1}$$

$$\times(x_1+\mathrm{i}x_2)^{q-1}(y_1+\mathrm{i}y_2)^{l-q}\{(x_1+\mathrm{i}x_2)y_3-x_3(y_1+\mathrm{i}y_2)\}^{\lambda}. \tag{13}$$

作为本征函数，归一化因子是不重要的，选取相乘因子，用函数 $Q_q^{l\lambda}(\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{y})$ 来代替函数 $\mathscr{Y}_{ll}^{(l+\lambda)q}(\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{y})$.

$$\begin{aligned} Q_q^{l\lambda}(\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{y}) = &\{(q-\lambda)!(l-q)!\}^{-1}(x_1+\mathrm{i}x_2)^{q-\lambda}(y_1+\mathrm{i}y_2)^{l-q} \\ &\times\{(x_1+\mathrm{i}x_2)y_3-x_3(y_1+\mathrm{i}y_2)\}^{\lambda},\quad \lambda\leqslant q\leqslant l,\ \lambda=0,\ 1. \end{aligned} \tag{14}$$

$Q_q^{l\lambda}(\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{y})$ 是下列算符 $\boldsymbol{L}^2$，L_3，$\boldsymbol{L}_{\boldsymbol{x}}^2$，$\boldsymbol{L}_{\boldsymbol{y}}^2$，$\Delta_{\boldsymbol{x}}$，$\Delta_{\boldsymbol{y}}$，$\Delta_{\boldsymbol{y}}$ 和宇称的共同本征函数，本征值分别是 $l(l+1)$，l，$q(q+1)$，$(l-q+\lambda)(l-q+\lambda+1)$，0，0，0 和 $(-1)^{l+\lambda}$，其中 $\boldsymbol{L}^2$，L_3 是总角动

量算符，$\boldsymbol{L}_x^2$ 和 $\boldsymbol{L}_y^2$ 是分角动量平方算符（见(8)式），Δ_x 和 Δ_y 是关于 Jacobi 坐标矢量 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{y}$ 的 Laplace 算符，Δ_{xy} 的定义如下：

$$\Delta_{xy} = \frac{\partial^2}{\partial x_1 \partial y_1} + \frac{\partial^2}{\partial x_2 \partial y_2} + \frac{\partial^2}{\partial x_3 \partial y_3}. \tag{15}$$

与之配组的有较小 L_3 本征值的本征函数可用降算符 L_- 的作用得到[34]．为简单起见，在本文中把 $\boldsymbol{L}^2$，L_3 和宇称的共同本征函数(本征值分别为 $l(l+1)$，l 和 $(-1)^{l+\lambda}$) 称为有确定角动量 l 和宇称 $(-1)^{l+\lambda}$ 的波函数．这样的波函数一般地可表为

$$\Psi_{l\lambda}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = \sum_{q=\lambda}^{l} \psi_q^{l\lambda}(\xi_1, \xi_2, \xi_3) Q_q^{l\lambda}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}), \quad \lambda = 0, 1. \tag{16}$$

此式表明，只有 $l+1-\lambda$ 个分角动量在构造总角动量本征函数中直接起作用，而其余无穷多个分角动量态的贡献已归结到径向波函数中去了．把(16)式代入 Schrödinger 方程(1)和(8)式，可得 $l+1-\lambda$ 个径向波函数 $\psi_q^{l\lambda}(\xi_1, \xi_2, \xi_3)$ 所满足的联立偏微分方程组，我们称它为径向方程：

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2M}\left\{\Delta\psi_q^{l\lambda} + 4q\frac{\partial \psi_q^{l\lambda}}{\partial \xi_1} + 4(l-q+\lambda)\frac{\partial \psi_q^{l\lambda}}{\partial \xi_2} + 2(q-\lambda)\frac{\partial \psi_{q-1}^{l\lambda}}{\partial \xi_3} + 2(l-q)\frac{\partial \psi_{q+1}^{l\lambda}}{\partial \xi_3}\right\} \\ = (E-V)\psi_q^{l\lambda}, \qquad \lambda \leqslant q \leqslant l,\ \lambda = 0, 1, \end{aligned} \tag{17}$$

此方程与项武德等人1)给出的方程是一致的．式中第 1 项 $\Delta\psi_q^{l\lambda}(\xi_1, \xi_2, \xi_3)$ 通过中间变量 ξ_j 来计算：

$$\begin{aligned} \Delta\psi_q^{l\lambda}(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = \Big\{ & 4\xi_1\frac{\partial^2}{\partial \xi_1^2} + 4\xi_2\frac{\partial^2}{\partial \xi_2^2} + 6\left(\frac{\partial}{\partial \xi_1} + \frac{\partial}{\partial \xi_2}\right) \\ & + (\xi_1+\xi_2)\frac{\partial^2}{\partial \xi_3^2} + 4\xi_3\left(\frac{\partial^2}{\partial \xi_1 \partial \xi_3} + \frac{\partial^2}{\partial \xi_2 \partial \xi_3}\right)\Big\}\psi_q^{l\lambda}(\xi_1, \xi_2, \xi_3). \end{aligned} \tag{18}$$

势函数只是内部变量的函数，因此径向方程 (17) 中只包含 3 个内部变量 ξ_1，ξ_2 和 ξ_3．

3 内部变量和正交函数基

借用在超球谐函数方法中处理 S 波径向波函数的复矢量坐标方法[7]，把 3 个内部变量分为长度量纲的超半径 ρ 和角变量 α 与 β：

$$\begin{gathered} \rho = \{\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{x} + \boldsymbol{y}\cdot\boldsymbol{y}\}^{1/2} = \{\xi_1 + \xi_2\}^{1/2}, \\ (\boldsymbol{x} + \mathrm{i}\boldsymbol{y})\cdot(\boldsymbol{x} + \mathrm{i}\boldsymbol{y}) = \xi_1 - \xi_2 + \mathrm{i}2\xi_3 = -\rho^2 \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\beta}\sin\alpha, \\ 0 \leqslant \rho < \infty, \quad 0 \leqslant \alpha \leqslant \pi/2, \ -\pi < \beta \leqslant \pi, \end{gathered} \tag{19}$$

在 3 个粒子的置换变换中，ρ 和 α 保持不变，只有 β 发生变化．当后两个粒子对换时，β 变成 $-\beta$，而当前两个粒子对换时，β 变成 $-\beta+2\omega$（见(9)式）．

通过直接的变量替换，(8)式的 Laplace 算符变成

1) 见 747 页脚注 1)

$$\Delta = \frac{1}{\rho^5}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho^5\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{4}{\rho^2}\Lambda^2, \quad \Lambda^2 = \frac{1}{\sin(2\alpha)}\frac{\partial}{\partial\alpha}\sin(2\alpha)\frac{\partial}{\partial\alpha} + \frac{1}{\sin^2\alpha}\frac{\partial^2}{\partial\beta^2}. \tag{20}$$

虽然形式上，这里的 Λ^2 与超球谐函数方法中的广义角动量算符有些相像，但它们有本质的不同：这里的 Λ^2 仅与内部变量 α 和 β 有关，而且适用于任何给定的总角动量和宇称情况.

根据 Λ^2 算符的具体形式，可把它的本征函数记作 $e^{i2\mu\beta}F(\zeta)$，其中 $\zeta = 2\alpha$，

$$\Lambda^2\{e^{i2\mu\beta}F(\zeta)\} = 4e^{i2\mu\beta}\left\{\frac{1}{\sin\zeta}\frac{d}{d\zeta}\sin\zeta\frac{d}{d\zeta} - \frac{2\mu^2(1+\cos\zeta)}{\sin^2\zeta}\right\}F(\zeta).$$

与 Wigner D-函数所满足的微分方程相比较[35]，

$$\left\{\frac{1}{\sin\omega}\frac{d}{d\omega}\sin\omega\frac{d}{d\omega} - \frac{\nu^2+\mu^2-2\nu\mu\cos\omega}{\sin^2\omega}\right\}d^j_{\nu\mu}(\omega) = -j(j+1)d^j_{\nu\mu}(\omega).$$

可得在 $\alpha=0$ 和 $\alpha=\pi/2$ 都有限的 Λ^2 算符的本征函数 $Z^J_\mu(\alpha,\beta)$ 为

$$\begin{aligned} Z^J_\mu(\alpha,\beta) &= Z^J_{-\mu}(\alpha,\beta)^* = \left(\frac{2J+1}{\pi}\right)^{1/2} e^{i2\mu\beta} d^J_{(-|\mu|)(|\mu|)}(2\alpha) \\ &= \left(\frac{2J+1}{\pi}\right)^{1/2} e^{i2\mu\beta}\sum_{r=0}^{J-|\mu|}\frac{(-1)^r(J+|\mu|+r)!(\sin\alpha)^{2r+2|\mu|}}{r!(J-|\mu|-r)!(2|\mu|+r)!}, \end{aligned} \tag{21}$$
$$\Lambda^2 Z^J_\mu(\alpha,\beta) = -\kappa_J Z^J_\mu(\alpha,\beta), \quad \kappa_J = 2J(2J+2),$$
$$J = 0,\ 1/2,\ 1,\ 3/2,\ \cdots,\ \mu = J,\ (J-1),\ \cdots,\ -(J+1),\ -J.$$

$Z^J_\mu(\alpha,\beta)$ 满足正交归一条件：

$$\int_{-\pi}^{\pi} d\beta \int_0^{\pi/2} d\alpha \sin\alpha\cos\alpha Z^J_\mu(\alpha,\beta)^* Z^{J'}_\nu(\alpha,\beta) = \delta_{JJ'}\delta_{\mu\nu}. \tag{22}$$

Coulomb 势 (3)式仅依赖于内部变量. 直接计算可得

$$|\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2|^2 = \frac{m_1+m_2}{m_1 m_2}\frac{\rho^2}{2}\{1 - \sin\alpha\cos(\beta-\beta_3)\}, \tag{23}$$

以及由 (1,2,3) 循环所得的另两个关系式. 由此式可见，当任何两个粒子重合时，$\alpha=\pi/2$. 在前两个粒子重合时 β 取值 β_3，类似地，在其他两粒子重合时，β 分别取值 β_1 或 β_2. β_j 的计算结果是

$$\begin{aligned} &\beta_1 = \pi, \quad \sin\beta_2 = \frac{-2(m_1m_2m_3)^{1/2}}{m_3+m_1m_2}, \quad \cos\beta_2 = \frac{m_3-m_1m_2}{m_3+m_1m_2}, \\ &\sin\beta_3 = \frac{2(m_1m_2m_3)^{1/2}}{m_2+m_1m_3}, \quad \cos\beta_3 = \frac{m_2-m_1m_3}{m_2+m_1m_3}. \end{aligned} \tag{24}$$

Coulomb 势 V 在基 $Z^J_\mu(\alpha,\beta)$ 中的矩阵元包含形式很类似的 3 项，它们都正比于 $\{1-\sin\alpha\cos(\beta-\beta_j)\}^{-1/2}$ 在基中的积分. 利用基关于 β 角的周期性，可作积分变量的平移，把 β_j 移出去：

$$\begin{aligned} \langle J,\mu | V(\alpha,\beta) | J',\nu\rangle &= \int_{-\pi}^{\pi} d\beta\int_0^{\pi/2} d\alpha\sin\alpha\cos\alpha Z^J_\mu(\alpha,\beta)^* V(\alpha,\beta) Z^{J'}_\nu(\alpha,\beta) \\ &= (e^2\sqrt{2}\rho^{-1})C(\nu-\mu)D(J,\mu,J',\nu), \end{aligned}$$
$$C(\nu) = \left(\frac{m_2m_3}{m_2+m_3}\right)^{1/2} Z_2Z_3 e^{i2\nu\beta_1} + \left(\frac{m_3m_1}{m_3+m_1}\right)^{1/2} Z_3Z_1 e^{i2\nu\beta_2}$$

$$+\left(\frac{m_1 m_2}{m_1+m_2}\right)^{1/2} Z_1 Z_2 \mathrm{e}^{\mathrm{i}\,2\nu\beta_3}, \tag{25}$$

$$D(J,\mu,J',\nu)=\int_{-\pi}^{\pi}\mathrm{d}\beta\int_0^{\pi/2}\mathrm{d}\alpha\sin\alpha\cos\alpha Z_\mu^J(\alpha,\beta)^*(1-\sin\alpha\cos\beta)^{-1/2}Z_\nu^{J'}(\alpha,\beta).$$

首先，容易看到，$D(J,\mu,J',\nu)$具有如下对称性：

$$D(J,\mu,J',\nu)=D(J,-\mu,J',-\nu)=D(J',\nu,J,\mu). \tag{26}$$

其次，$D(J,\mu,J',\nu)$ 中的 $d^J d^{J'}$ 因子可通过 Clebsch-Gordan 系数化简，

$$d^J_{(-|\mu|)|\mu|}(2\alpha)d^{J'}_{(-|\nu|)|\nu|}(2\alpha)=\sum_{n=N}^{J+J'-|\mu|-|\nu|}(-1)^{J+J'-|\mu|-|\nu|-n}$$

$$\times(\langle J,|\mu|,J',|\nu|\,|\,n+|\mu|+|\nu|,|\mu|+|\nu|\rangle)^2 d^{n+|\mu|+|\nu|}_{(-|\mu|-|\nu|)(|\mu|+|\nu|)}(2\alpha),$$

其中 N 是 0 和 $|J-J'|-|\mu|-|\nu|$ 中较大者．由此得

$$D(J,\mu,J',\nu)=[(2J+1)(2J'+1)]^{1/2}(-1)^{J+J'-|\mu|-|\nu|}$$

$$\times\sum_{n=N}^{J+J'-|\mu|-|\nu|}(\langle J,|\mu|,J',|\nu|\,|\,n+|\mu|+|\nu|,|\mu|+|\nu|\rangle)^2 I_n, \tag{27}$$

$$I_n=\frac{(-1)^n}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi}\mathrm{d}\beta\mathrm{e}^{\mathrm{i}\,2(\nu-\mu)\beta}\int_0^{\pi/2}\mathrm{d}\alpha\,\frac{\sin 2\alpha d^{n+|\mu|+|\nu|}_{(-|\mu|-|\nu|)(|\mu|+|\nu|)}(2\alpha)}{(1-\sin\alpha\cos\beta)^{1/2}}.$$

第三，把函数$(1-\sin\alpha\cos\beta)^{-1/2}$关于变量$(\sin\alpha\cos\beta)$作幂级数展开，收敛半径是 1，因而在区域 $0\leqslant\alpha<\pi/2$ 中的任意给定值 α，级数关于 β 是一致收敛的，可以对 β 作逐项积分．级数前几项的积分值为零，只有在第 $2|\mu-\nu|$ 项后积分值才开始不为零．把级数的求和指标作平移后，得

$$I_n=\int_0^{\pi/2}\mathrm{d}\alpha\sin 2\alpha d^{n+|\mu|+|\nu|}_{(-|\mu|-|\nu|)(|\mu|+|\nu|)}(2\alpha)$$

$$\times\sum_{t=0}^{\infty}\frac{(-1)^n(4t+4|\mu-\nu|)!(\sin\alpha)^{2t+2|\mu-\nu|}}{8^{2t+2|\mu-\nu|}t!(t+2|\mu-\nu|)!(2t+2|\mu-\nu|)!}.$$

关于 $\sin\alpha$ 的幂级数收敛半径仍是 1，在区域 $0\leqslant\alpha\leqslant\pi/2$ 中级数不是一致收敛的，因为在物理上，$\alpha=\pi/2$ 包含了有两个粒子相重合的情况．作变数替换 $\eta=\sin\alpha$，把 $\eta=1$ 的点挖掉，在闭区域 $0\leqslant\eta\leqslant\eta_0$级数一致收敛，可以逐项积分，其中 η_0是略小于 1 的正数．以(21)式 d^J函数的展开式代入，进行逐项积分后，得

$$I_n(\eta_0)=\sum_{t=0}^{\infty}\frac{(4t+4|\mu-\nu|)!}{8^{2t+2|\mu-\nu|}t!(t+2|\mu-\nu|)!(2t+2|\mu-\nu|)!}$$

$$\times\sum_{r=0}^{n}\frac{(-1)^{n-r}(n+2|\mu|+2|\nu|+r)!\,\eta_0^{2(t+r+|\mu|+|\nu|+|\mu-\nu|+1)}}{r!(n-r)!(2|\mu|+2|\nu|+r)!(t+r+|\mu|+|\nu|+|\mu-\nu|+1)}. \tag{28}$$

可用 Newton 二项式公式和数学归纳法证明下面恒等式：

$$\sum_{r=0}^{n}\frac{(-1)^{n-r}(n+m+r)!}{r!(n-r)!(m+r)!}=1,$$

$$\sum_{r=0}^{n}\frac{(-1)^{n-r}(n+m+r)!}{r!(n-r)!(m+r)!(m+a+r)}=\frac{(a-n)_n}{(m+a)_{n+1}},$$

从而把 $\eta_0=1$ 时的 $I_n(\eta_0)$ 表示成一个正项级数：

$$I_n(1)=$$
$$\sum_{t=0}^{\infty}\frac{(4t+4|\mu-\nu|)!(t-|\mu|-|\nu|+|\mu-\nu|-n+1)_n}{8^{2t+2|\mu-\nu|}t!(t+2|\mu-\nu|)!(2t+2|\mu-\nu|)!(t+|\mu|+|\nu|+|\mu-\nu|+1)_{n+1}},\tag{29}$$

其中 $(a)_n=a(a+1)\cdots(a+n-1)$ 和 $(a)_0=1$. (29)式的级数是收敛的，因为在 t 足够大时，$t+1$ 项与 t 项之比近似为 $1-2/t$. 既然在 1 邻近，$\eta_0\leqslant 1$ 的一个足够小的闭区域内，$I_n(\eta_0)$ 式中关于 t 级数每一项的绝对值都不大于 $I_n(1)$ 中级数的相应项，可见(28)式给出的 $I_n(\eta_0)$ 在上述区域内一致收敛，可逐项取 $\eta_0\to 1$ 的极限，而 $I_n(\eta_0)$ 的极限正是(29)式给出的正项级数. 把(29)式代入(27)式，就得到系数 $D(J,\mu,J',\nu)$.

在径向方程(17)中余下的微分算符也可用新的内部变量表出，并计算它们对正交函数基 $Z^J_\mu(\alpha,\beta)$ 的作用.

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial\xi_1}&=\frac{1}{2\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}-\frac{1}{\rho^2}\left\{\tan\alpha\frac{\partial}{\partial\alpha}+\left[\frac{\cos\beta}{\cos\alpha}\frac{\partial}{\partial\alpha}-\frac{\sin\beta}{\sin\alpha}\frac{\partial}{\partial\beta}\right]\right\},\\
\frac{\partial}{\partial\xi_2}&=\frac{1}{2\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}-\frac{1}{\rho^2}\left\{\tan\alpha\frac{\partial}{\partial\alpha}-\left[\frac{\cos\beta}{\cos\alpha}\frac{\partial}{\partial\alpha}-\frac{\sin\beta}{\sin\alpha}\frac{\partial}{\partial\beta}\right]\right\},\\
\frac{\partial}{\partial\xi_3}&=\frac{2}{\rho^2}\left\{\frac{\sin\beta}{\cos\alpha}\frac{\partial}{\partial\alpha}+\frac{\cos\beta}{\sin\alpha}\frac{\partial}{\partial\beta}\right\}.
\end{aligned}\tag{30}$$

$$\tan\alpha\frac{\partial}{\partial\alpha}Z^J_\mu(\alpha,\beta)=2JZ^J_\mu(\alpha,\beta)+\sum_{j=|\mu|}^{J-1}2(-1)^{J-j}[(2j+1)(2J+1)]^{1/2}Z^j_\mu(\alpha,\beta),\tag{31}$$

当 $\mu>0$ 时，有

$$\left\{\frac{\cos\beta}{\cos\alpha}\frac{\partial}{\partial\alpha}-\frac{\sin\beta}{\sin\alpha}\frac{\partial}{\partial\beta}\right\}Z^J_{\pm\mu}(\alpha,\beta)$$
$$=\sum_{j=\mu+1/2}^{J-1/2}(-1)^{J-j+1/2}[(2j+1)(2J+1)]^{1/2}Z^j_{\pm(\mu+1/2)}(\alpha,\beta)$$
$$+\sum_{j=\mu-1/2}^{J-1/2}(-1)^{J-j-1/2}[(2j+1)(2J+1)]^{1/2}Z^j_{\pm(\mu-1/2)}(\alpha,\beta),$$

$$\left\{\frac{\cos\beta}{\cos\alpha}\frac{\partial}{\partial\alpha}-\frac{\sin\beta}{\sin\alpha}\frac{\partial}{\partial\beta}\right\}Z^J_0(\alpha,\beta)$$
$$=\sum_{j=1/2}^{J-1/2}(-1)^{J-j+1/2}[(2j+1)(2J+1)]^{1/2}\{Z^j_{1/2}(\alpha,\beta)+Z^j_{-1/2}(\alpha,\beta)\}$$

$$\pm\mathrm{i}\left\{\frac{\sin\beta}{\cos\alpha}\frac{\partial}{\partial\alpha}+\frac{\cos\beta}{\sin\alpha}\frac{\partial}{\partial\beta}\right\}Z^J_{\pm\mu}(\alpha,\beta)$$
$$=\sum_{j=\mu+1/2}^{J-1/2}(-1)^{J-j+1/2}[(2j+1)(2J+1)]^{1/2}Z^j_{\pm(\mu+1/2)}(\alpha,\beta)$$

$$- \sum_{j=\mu-1/2}^{J-1/2} (-1)^{J-j-1/2}[(2j+1)(2J+1)]^{1/2} Z^{j}_{\pm(\mu-1/2)}(\alpha, \beta),$$

$$\mathrm{i}\left\{\frac{\sin\beta}{\cos\alpha}\frac{\partial}{\partial\alpha} + \frac{\cos\beta}{\sin\alpha}\frac{\partial}{\partial\beta}\right\} Z^{J}_{0}(\alpha, \beta)$$

$$= \sum_{j=1/2}^{J-1/2} (-1)^{J-j+1/2}[(2j+1)(2J+1)]^{1/2}\{Z^{j}_{1/2}(\alpha, \beta) - Z^{j}_{-1/2}(\alpha, \beta)\}. \tag{32}$$

现在，把径向波函数 $\psi^{l\lambda}_{q}$ 按此正交函数基 $Z^{J}_{\mu}(\alpha, \beta)$ 展开，

$$\psi^{l\lambda}_{q}(\rho, \alpha, \beta) = \sum_{2J=0}^{\infty}\sum_{\mu=-J}^{J} R^{l\lambda}_{q,J,\mu}(\rho) Z^{J}_{\mu}(\alpha, \beta), \tag{33}$$

并代入径向方程 (17)，得到关于函数 $R^{l\lambda}_{q,J,\mu}(\rho)$ 的联立常微分方程组. 这方程组有一个重要的特点，就是它的每一个常微分方程所包含的与 ρ 有关的部分完全相同：

$$\rho^2\frac{\partial^2}{\partial\rho^2} + \rho(5+2l+2\lambda)\frac{\partial}{\partial\rho} - k^2\rho^2. \tag{34}$$

因此，可把函数 $R^{l\lambda}_{q,J,\mu}(\rho)$ 按缔合 Laguerre 多项式展开，以消去微分算符，从而把联立常微分方程组简化为联立代数方程组. 具体说，

$$R^{l\lambda}_{q,J,\mu}(\rho) = \mathrm{e}^{-k\rho}\sum_{p=0}^{\infty} f^{l\lambda}_{p,q,J,\mu} L^{(2l+2\lambda+4)}_{p}(2k\rho), \tag{35}$$

其中

$$L^{(m)}_{n}(\rho) = \frac{\rho^{-m}\mathrm{e}^{\rho}}{n!}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}\rho^n}(\mathrm{e}^{-\rho}\rho^{n+m}) = \sum_{r=0}^{n}\frac{(-1)^{n-r}(n+m)!\,\rho^{n-r}}{r!(n-r)!(n-r+m)!}, \quad n \geqslant 0, \tag{36}$$

满足

$$\rho\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2}L^{(m)}_{n}(\rho) + (m+1-\rho)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}L^{(m)}_{n}(\rho) + nL^{(m)}_{n}(\rho) = 0,$$

$$\rho L^{(m)}_{n}(\rho) = -(n+1)L^{(m)}_{n+1}(\rho) + (2n+m+1)L^{(m)}_{n}(\rho) - (n+m)L^{(m)}_{n-1}(\rho),$$

$$\int_0^{\infty}\mathrm{d}\rho\,\mathrm{e}^{-\rho}\rho^{m}L^{(m)}_{n}(\rho)L^{(m)}_{n'}(\rho) = \delta_{nn'}\frac{(n+m)!}{n!}. \tag{37}$$

由此得

$$\left\{\rho^2\frac{\partial^2}{\partial\rho^2} + \rho(5+2l+2\lambda)\frac{\partial}{\partial\rho} - k^2\rho^2\right\}\mathrm{e}^{-k\rho}L_{p}^{(2l+2\lambda+4)}(2k\rho)$$
$$= -\mathrm{e}^{-k\rho}(p+l+\lambda+5/2)(2k\rho)L^{(2l+2\lambda+4)}_{p}(2k\rho). \tag{38}$$

总结起来，给定总轨道角动量 l 和宇称 $(-1)^{l+\lambda}$ ($\lambda=0$ 或 1) 的三体 Schrödinger 方程解可表为二重无穷级数

$$\Psi_{l\lambda}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = \mathrm{e}^{-k\rho}\sum_{q=\lambda}^{l}\sum_{p=0}^{N_1}\sum_{2J=0}^{N_2}\sum_{\mu=-J}^{J} f^{l\lambda}_{p,q,J,\mu}L^{(2l+2\lambda+4)}_{p}(2k\rho)Z^{J}_{\mu}(\alpha, \beta)Q^{l\lambda}_{q}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}), \tag{39}$$

其中 N_1 和 N_2 是无穷大的正整数，级数中的系数 $f^{l\lambda}_{p,q,J,\mu}$ 满足如下联立线性代数方程组：

$$
\begin{aligned}
&\left(\frac{\hbar^2 k}{\sqrt{2}Me^2}\right)\Big\{(p+l+\lambda+3/2)pf^{l\lambda}_{p-1,q,J,\pm\mu}-\big[4\kappa_J+8J(l+\lambda)\\
&+2(p+l+\lambda+5/2)^2\big]f^{l\lambda}_{p,q,J,\pm\mu}+(p+l+\lambda+7/2)(p+2l+2\lambda+5)\,f^{l\lambda}_{p+1,q,J,\pm\mu}\\
&-8(l+\lambda)\sum_{j=J+1}^{n}(-1)^{J-j}\big[(2J+1)(2j+1)\big]^{1/2}f^{l\lambda}_{p,q,j,\pm\mu}\\
&+4(l-2q+\lambda)\Big[\sum_{j=J+1/2}^{n}(-1)^{j-J+1/2}\{(2J+1)(2j+1)\}^{1/2}f^{l\lambda}_{p,q,j,\pm(\mu-1/2)}\\
&+\sum_{j=J+1/2}^{n}(-1)^{j-J-1/2}\{(2J+1)(2j+1)\}^{1/2}f^{l\lambda}_{p,q,j,\pm(\mu+1/2)}\Big]\\
&\mp i4(q-\lambda)\Big[\sum_{j=J+1/2}^{n}(-1)^{j-J+1/2}\{(2J+1)(2j+1)\}^{1/2}f^{l\lambda}_{p,(q-1),j,\pm(\mu-1/2)}\\
&-\sum_{j=J+1/2}^{n}(-1)^{j-J-1/2}\{(2J+1)(2j+1)\}^{1/2}f^{l\lambda}_{p,(q-1),j,\pm(\mu+1/2)}\Big]\\
&\mp i4(l-q)\Big[\sum_{j=J+1/2}^{n}(-1)^{j-J+1/2}\{(2J+1)(2j+1)\}^{1/2}f^{l\lambda}_{p,(q+1),j,\pm(\mu-1/2)}\\
&-\sum_{j=J+1/2}^{n}(-1)^{j-J-1/2}\{(2J+1)(2j+1)\}^{1/2}f^{l\lambda}_{p,(q+1),j,\pm(\mu+1/2)}\Big]\Big\}\\
=&\sum_{2j=0}^{N_2}\sum_{\nu=-j}^{j}C(\nu\mp\mu)D(J,\pm\mu,j,\nu)\{-pf^{l\lambda}_{(p-1),q,j,\nu}\\
&+(2p+2l+2\lambda+5)f^{l\lambda}_{p,q,j,\nu}-(p+2l+2\lambda+5)\,f^{l\lambda}_{(p+1),q,j,\nu}\},\\
&\left(\frac{\hbar^2 k}{\sqrt{2}Me^2}\right)\{(p+l+\lambda+3/2)pf^{l\lambda}_{p-1,q,J,0}-\big[4\kappa_J+8J(l+\lambda)\\
&+2(p+l+\lambda+5/2)^2\big]\,f^{l\lambda}_{p,q,J,0}+(p+l+\lambda+7/2)(p+2l+2\lambda+5)f^{l\lambda}_{p+1,q,J,0}\\
&-8(l+\lambda)\sum_{j=J+1}^{n}(-1)^{J-j}\big[(2J+1)(2j+1)\big]^{1/2}\,f^{l\lambda}_{p,q,j,0}\\
&+4(l-2q+\lambda)\sum_{j=J+1/2}^{n}(-1)^{j-J-1/2}\{(2J+1)(2j+1)\}^{1/2}\big[f^{l\lambda}_{p,q,j,1/2}+f^{l\lambda}_{p,q,j,(-1/2)}\big]\\
&+i4(q-\lambda)\sum_{j=J+1/2}^{n}(-1)^{j-J-1/2}\{(2J+1)(2j+1)\}^{1/2}\big[f^{l\lambda}_{p,(q-1),j,1/2}-f^{l\lambda}_{p,(q-1),j,(-1/2)}\big]\\
&+i4(l-q)\sum_{j=J+1/2}^{n}(-1)^{j-J-1/2}\{(2J+1)(2j+1)\}^{1/2}\big[f^{l\lambda}_{p,(q+1),j,1/2}-f^{l\lambda}_{p,(q+1),j,(-1/2)}\big]\Big\}\\
=&\sum_{2j=0}^{N_2}\sum_{\nu=-j}^{j}C(\nu)D(J,0,j,\nu)\{-pf^{l\lambda}_{(p-1),q,j,\nu}+(2p+2l+2\lambda+5)f^{l\lambda}_{p,q,j,\nu}\\
&-(p+2l+2\lambda+5)f^{l\lambda}_{(p+1),q,j,\nu}\},
\end{aligned}
\tag{40}
$$

其中 $\mu>0$，n 取 $N_2/2$ 或 $(N_2-1)/2$．系数 $D(J,\mu,J',\nu)$ 和 $C(n)$ 已在(27)和(28)式中给出．式中因子 $\hbar^2k/(\sqrt{2}Me^2)$ 的平方正是负能量以 $Me^4/\hbar^2$ 作单位的取值．这因子可由联立线性代数方程组的系数行列式为零的条件来计算．这一计算问题容易转化为本征值的计算问题．在实际数值计算中必须把无穷级数截断，N_j 取有限值．这是计算误差的主要来源．为了提高计算精度，需要采取适当的加快级数收敛的方法，消除势函数奇点的负面影响，这些将在以后的文章中再详细讨论．

4 讨论

本文对量子三体问题的 Schrödinger 方程用简单的方法把质心平动自由度和系统转动自由度完全地与系统内部自由度分离开来．对任意给定的总轨道角动量 l 和宇称 $(-1)^{l+\lambda}$，证明了仅有 $l+1-\lambda$ 个分角动量态在组合成总角动量本征函数中起作用，而其余的无穷多个分角动量态的贡献可归结到径向波函数的贡献中去，从而把三体问题的 Schrödinger 方程简化为关于 3 个内部变量的联立偏微分方程组，这方程组的数目就是径向波函数的数目，即 $l+1-\lambda$．进一步把径向波函数按一组正交归一的完备函数基展开，任何二体作用的势函数也可按此函数基展开，从而把三体问题的 Schrödinger 方程简化为联立线性代数方程组．这套方法适用于有或没有全同粒子的任何三粒子体系，适用于仅依赖于相对距离的任何二体相互作用势．我们以 Coulomb 作用为例具体计算了势函数矩阵元的公式．本文的主要目的在于发展和完备这一套方法的运算公式，而不是具体的数值计算技术．全部公式的推演都没有引入任何近似，数值计算的误差主要来自无穷级数的截断．

为了说明这套方法是实际可行的，我们曾以氦原子 S 波和 P 波的最低能级为例作了尝试性的计算，采用单精度的 Fortran 程序，略去电子关于核的相对质量的二级小量，得到的结果与实验观测值相比，误差都在千分之几的量级，说明此方法是确实可行的．

致谢 作者感谢聂华桐和项武义教授把作者的注意力吸引到量子三体问题中来，尤其感谢项武义教授把他的论文在发表之前介绍给作者．作者也要感谢侯伯元、周善有和刘煜奋教授的有益的讨论．

参 考 文 献

1 Delves L M. Tertiary and general-order collisions. Nucl Phys, 1959, 9(3): 391 ~ 399
2 Delves L M. Tertiary and general-order collisions (Ⅱ). Nucl Phys, 1960, 20(2): 275 ~ 308
3 Smith F T. A symmetric representation for three-body problems. J Math Phys, 1962, 3(4): 735 ~ 748
4 Smith F T. Generalized angular momentum in many-body collisions. Phys Rev, 1960, 120(3): 1 058 ~ 1 069
5 Krivec R. Hyperspherical-harmonics methods for few-body problems. Few-Body Systems, 1998, 25: 199 ~ 238
6 Fano U, Green D, Bohn J L, et al. Geometry and symmetries of multi-particle systems. J Phys B, 1999, 32: R1 ~ R37
7 Haftel M I, Mandelzweig V B. Fast convergent hyperspherical harmonic expansion for three-body systems. Ann Phys (NY), 1989, 189(1): 29 ~ 52
8 Giocobiano E, Biruben F. Energy level measurements and Lamb shift in helium. J Phys B, 1982, 15(2): L 385 ~ L 388
9 Juncar P, Berry H G, Damashini R, et al. Energies of some triplet levels in $^+$He I. J Phys B, 1983, 16(3): 381 ~ 388

10 Hlousek L, Lee S A, Fairbank W M. Precision wave length measurements and new experimental Lamb shifts in helium. Phys Rev Lett, 1983, 50(5): 328 ~ 331

11 Sansonetti C J, Martin W C. Accurate wave-number measurements for the ^{4}He I 1s 2p-1s 3d transitions and comparisons of several term separations with theory. Phys Rev A, 1984, 29(1): 159 ~ 168

12 Radzig A A, Smirnov B M. Reference Data on Atoms, Molecules, and Ions. Berlin: Springer-Verlag, 1985

13 Freund D E, Huxtable B D, Morgan Ⅲ J D. Variational calculations on the helium isoelectronic sequence. Phys Rev A, 1984, 29(2): 980 ~ 982

14 Haftel M I, Mandelzweig V B. A fast convergent hyperspherical expansion for the helium ground state. Phys Lett A, 1987, 120(5): 232 ~ 236

15 Haftel M I, Mandelzweig V B. Correlation-function hyperspherical harmonic calculations of the ppμ, ddμ, and ttμ molecular ions. Phys Rev A, 41(5): 2 339 ~ 2 343

16 Krivec R, Mandelzweig V B. Matrix elements of potentials in the correlation-function hyperspherical-harmonic method. Phys Rev A, 1990, 42(7): 3 779 ~ 3 788

17 Mandelzweig V B. Hyperspherical approach to few body problems: A summary and new developments. Nucl Phys A, 1990, 508: 63c ~ 72c

18 Barnea N, Mandelzweig V B. Matrix elements of potentials for $L = 1$ hyperspherical states. Phys Rev A, 1990, 41(9): 5 209 ~ 5 212

19 Barnea N, Mandelzweig V B. Matrix elements between vector hyperspherical states. Phys Rev A, 1991, 44(11): 7 053 ~ 7 064

20 Berkovic S, Krivec R, Mandelzweig V, et al. Hyperspherical approach to the calculation of few-body atomic resonances. Phys Rev A, 1997, 55(2): 988 ~ 993

21 Lin C D. Doubly excited states, including new classification schemes. Adv At Mol Phys, 1986, 22: 77 ~ 141

22 Tang J Z, Watanabe S, Matsuzawa M. General computational method for two-electron systems. Phys Rev A, 1992, 46: 2 437 ~ 2 444

23 Zhou B, Lin C D, Tang J Z, et al. A hyperspherical close-coupling calculation of photoionization from the He atom, Li^+ and C^{4+} ions: I. Below the $N = 2$ threshold. J Phys B, 1993, 26(16): 2 555 ~ 2 573

24 Zhou B, Lin C D. A hyperspherical close-coupling calculation of photoionization from the He atom, Li^+ and C^{4+} ions: Ⅱ. Between the $N = 2$ and $N = 3$ thresholds. J Phys B, 1993, 26(16): 2 575 ~ 2 587

25 Heim T A, Armen G B, Rau A R P. Pair-Rydberg description of doubly excited states: Diabatic evolution of correlation patterns. Phys Rev A, 1997, 55(4): 2 674 ~ 2 685

26 Fabre de la Ripelle M, Haftel M I, Larsen S Y. Potential-harmonic expansion for atomic wave functions. Phys Rev A, 1991, 44(11): 7 084 ~ 7 091

27 Feagin J M, Macek J, Starace A F. Use of the Fock expansion for ^1S-state wave functions of two-electron atoms and ions. Phys Rev A, 1985, 32(6): 3 219 ~ 3 230

28 Ho Y K. P-wave doubly excited resonances in He. J Phys B, 1982, 15(19): L 691 ~ L 695

29 Ho Y K. Doubly excited $^1S^e$ resonance states of helium atoms below the N hydrogenic thresholds with $N \leqslant 6$. Phys Rev A, 1986, 34(5): 4 402 ~ 4 404

30 Yan J, Qu Y Z, Voky L, et al. Polarization effect on He doubly excited states below the $N = 2$ threshold of He^+. Phys Rev A, 1998, 57(2): 997 ~ 1 005

31 Selles P, Mazeau J, Huetz A. Wannier theory for P^o and D^e states of two electrons. J Phys B, 1987, 20(19): 5 183 ~ 5 193

32 Heim T A, Green D. Alternative sets of hyperspherical harmonic: Satisfying cusp conditions through frame transformations. J Math Phys, 1999, 40(4): 2 162 ~ 2 180

33 Viviani M. Transformation coefficients of hyperspherical harmonic functions of an A-body system. Few-Body Systems, 1998, 25: 177 ~ 197

34 Wigner E P. Group Theory and its Application to the Quantum Mechanics of Atomic Spectra. New York: Academic Press, 1959

35 Edmonds A R. Angular Momentum in Quantum Mechanics. Princeton: Princeton University Press, 1957