

两体自旋轨道相互作用矩阵元的公式

张庆营

(湖南大学)

摘 要

本文推导了壳层模型中两个粒子之间的两体自旋轨道相互作用矩阵元的普遍公式,本文的公式比 Hope 和 Longdon 的公式简单。

一、引 言

根据核力的介子理论、核子核子散射实验和核结构的研究,都表明了在三核子相互作用中,存在着两体自旋轨道相互作用项^[1]。

本文推导了壳层模型中单粒子态的两体自旋轨道相互作用算符矩阵元的普遍公式。J. Hope 和 L. W. Longdon 曾经推导过这种公式^[2]。他们的推导方法很麻烦,首先是把两体自旋轨道相互作用算符展开,组合成张量算符的张量积之和,形成很冗长而复杂的表达式,然后再去求矩阵元,得出的公式很复杂。我们是在求矩阵元的过程中将算符展开,这样就不会出现很冗长复杂的表达式,推导过程比较简易清楚,更加上利用了我们推出的较紧凑的新的梯度公式,由此得到的两体自旋轨道相互作用算符矩阵元的公式比 Hope 和 Longdon 的公式简单。

本文仍然用 Racah 的张量算符代数方法^[3],具体的运算方法和 Hope 和 Longdon 的有所不同。下面第二节列出一些要用到的张量算符代数的公式,并推导了新的梯度公式。第三节叙述推导过程及结果,最后举出了同科粒子的特例,这时公式大为简化。

二、预 备 公 式

两粒子自旋轨道相互作用算符的形式如下:

$$V^{LS} \equiv V_{00}^{LS} = \xi(r) \mathbf{L}_R \cdot \mathbf{S}. \quad (1)$$

这里 $\xi(r)$ 是径向部分, $r \equiv r_{ab} = |\mathbf{r}_b - \mathbf{r}_a|$ 是两个粒子之间的距离, \mathbf{r}_a 和 \mathbf{r}_b 分别是粒子 a 和粒子 b 的矢径。而

$$\mathbf{L}_R = \frac{1}{2\hbar} (\mathbf{r}_b - \mathbf{r}_a) \times (\mathbf{p}_b - \mathbf{p}_a), \quad (2a)$$

是两个粒子的相对运动轨道角动量算符, \mathbf{p}_a 和 \mathbf{p}_b 是两个粒子的动量算符,总自旋算符是

$$\mathbf{S} = \mathbf{s}_a + \mathbf{s}_b = \frac{1}{2} (\boldsymbol{\sigma}_a + \boldsymbol{\sigma}_b). \quad (2b)$$

相对运动轨道角动量算符 \mathbf{L}_R 可以化为三项之和:

$$\mathbf{L}_R = \frac{1}{2} \mathbf{L} - \frac{1}{2\hbar} (\mathbf{r}_b \times \mathbf{p}_a) - \frac{1}{2\hbar} (\mathbf{r}_a \times \mathbf{p}_b), \quad (3)$$

其中

$$\mathbf{L} = \mathbf{l}_a + \mathbf{l}_b = \frac{1}{\hbar} (\mathbf{r}_a \times \mathbf{p}_a) + \frac{1}{\hbar} (\mathbf{r}_b \times \mathbf{p}_b). \quad (4)$$

下面要用到这两个关系式:

$$\mathbf{T} \cdot \mathbf{U} = (\mathbf{T}^{(1)} \cdot \mathbf{U}^{(1)}), \quad (5)$$

$$[\mathbf{T} \times \mathbf{U}]_q^{(1)} = -i\sqrt{2} [\mathbf{T}^{(1)} \times \mathbf{U}^{(1)}]_q^{(1)}, \quad (6)$$

上式左边 $\mathbf{T} \times \mathbf{U}$ 是直角坐标系中两个矢量的矢量积, 右边是球面矢量 $\mathbf{T}^{(1)}$ 和 $\mathbf{U}^{(1)}$ 取张量积所构成的球面矢量的第 q 个分量.

将矢径 \mathbf{r} 化为球面坐标的三个分量就是:

$$r_m^{(1)} = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} r Y_m^1(\theta, \varphi) = r C_m^{(1)}(\theta, \varphi). \quad (7)$$

利用(6)式和(7)式可得

$$-\frac{1}{2\hbar} [\mathbf{r}_b \times \mathbf{p}_a]_q^{(1)} = \frac{\sqrt{2}}{2} r_b [C_b^{(1)} \times \nabla_a^{(1)}]_q^{(1)}, \quad (8)$$

梯度算符 $\nabla_q^{(1)}$ 作用于轨道波函数 $\phi_r(r) Y_m^l(\theta, \varphi)$ ($\phi_r(r)$ 是径向波函数, r 是某种量子数) 上得:

$$\begin{aligned} & \nabla^{(1)} \phi_r(r) Y_m^l(\theta, \varphi) \\ &= \left(\frac{l+1}{2l+3}\right)^{\frac{1}{2}} \langle l1mq | l1, l+1, m+q \rangle Y_{m+q}^{l+1} \left(\frac{\partial}{\partial r} - \frac{l}{r}\right) \phi_r(r) \\ & \quad - \left(\frac{l}{2l-1}\right)^{\frac{1}{2}} \langle l1mq | l1, l-1, m+q \rangle Y_{m+q}^{l-1} \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{l+1}{r}\right) \phi_r(r), \end{aligned} \quad (9)$$

梯度算符矩阵元根据 Wigner-Eckart 定理化为

$$\begin{aligned} & \langle \gamma' l' m' | \nabla_q^{(1)} | \gamma l m \rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2l'+1}} \langle l1mq | l1 l' m' \rangle \langle \gamma' l' || \nabla^{(1)} || \gamma l \rangle. \end{aligned} \quad (10)$$

将上式和(9)式比较, 即可求出约化矩阵元

$$\begin{aligned} \langle \gamma' l' || \nabla^{(1)} || \gamma l \rangle &= (\delta_{l'l} - 1) (-1)^{\frac{l'-l+1}{2}} \sqrt{\frac{l'+l+1}{2}} \\ & \quad \times \langle \gamma' | \left[\frac{\partial}{\partial r} + (-1)^{\frac{l'-l+1}{2}} \left(\frac{3l-l'+1}{2} \right) \frac{1}{r} \right] | \gamma \rangle \\ &= \langle l' || C^{(1)} || l \rangle \langle \gamma' | \left(\frac{\partial}{\partial r} + C^{l'l} \frac{1}{r} \right) | \gamma \rangle, \end{aligned} \quad (11)$$

其中

$$C^{l'l} = (-1)^{\frac{l'-l+1}{2}} \left(\frac{3l-l'+1}{2} \right). \quad (12)$$

(11)式就是我们推得的梯度公式,可见梯度算符 $\nabla_q^{(l)}$ 的约化矩阵元和 $C_q^{(l)}(\theta, \varphi)$ 的约化矩阵元成简单的比例关系,这一性质对我们化简下节的公式很有用.

三、公式推导及结果

现在推导 LS 耦合表象中两粒子自旋轨道相互作用算符矩阵元的显表示式. 设两个粒子分别填充在 nl 和 $n'l'$ 的两个单粒子态上,在 LS 耦合表象中,这两个粒子的两体自旋轨道相互作用算符的矩阵元是:

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \langle \beta l_a l_b(L) s_a s_b(S) JM | \xi(r_{ab}) \\ &\quad \times \mathbf{L}_R \cdot \mathbf{S} | \beta' l'_a l'_b(L') s'_a s'_b(S') JM \rangle \\ &= \langle \beta l_a l_b(L) s s(S) JM | \xi(r) \mathbf{L}_R \cdot \mathbf{S} | \beta' l'_a l'_b(L') s s(S') JM \rangle \delta_{s, s'} \delta_{s, 1} \\ &\quad \left(s_a = s_b = s'_a = s'_b = s = \frac{1}{2}, \quad S = 0, 1 \right). \end{aligned} \quad (13)$$

上式没有写出主量子数 n 和 n' , 至于 β 和 β' , 则是为了唯一确定这个态的其他量子数(如果需要的话).

因为矩阵元(13)和 M 无关,今后一般不写出 M .

利用(5)式,可将(13)式化为(参看[4], p.111):

$$\langle E \rangle = \sqrt{6} (-1)^{1+L'-J} W(1 L 1 L'; J 1) A_{LL'} \delta_{s, s'} \delta_{s, 1}, \quad (14)$$

$W(1 L 1 L'; J 1)$ 是 Racah 系数,又

$$A_{LL'} = \langle \beta n_a l_a, n_b l_b; l_a l_b L | \xi(r) L_R^{(l)} | \beta' n'_a l'_a, n'_b l'_b; l'_a l'_b L' \rangle. \quad (15)$$

其中 $\beta n_a l_a, n_b l_b$ 是代表波函数的径向部分,三个数 $L, 1$ 和 L' 之间应满足三角条件 $\Delta(L 1 L')$, 所以没有 A_{00} 的项.

根据(3)式,约化矩阵元 $A_{LL'}$ 可以分为三项,以下将这三项一一求出.

(1) 第一项

$$\begin{aligned} A_{LL'}(1) &= \frac{1}{2} \langle \beta n_a l_a, n_b l_b; l_a l_b L | \xi(r) L^{(l)} | \beta' n'_a l'_a, n'_b l'_b; l'_a l'_b L' \rangle \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\substack{\beta'' n''_a l''_a \\ n''_b l''_b}} \langle \beta n_a l_a, n_b l_b; l_a l_b L | \xi(r) | \beta'' n''_a l''_a, n''_b l''_b; l''_a l''_b L'' \rangle \\ &\quad \times \langle \beta'' n''_a l''_a, n''_b l''_b; l''_a l''_b L'' | L^{(l)} | \beta' n'_a l'_a, n'_b l'_b; l'_a l'_b L' \rangle \frac{1}{\sqrt{2L''+1}} \\ &\quad \times \delta_{\beta'' \beta'} \delta_{n''_a n'_a} \delta_{n''_b n'_b} \delta_{l''_a l'_a} \delta_{l''_b l'_b} \delta_{L'' L'} \\ &= \frac{1}{2} \sqrt{L(L+1)} \langle \beta n_a l_a, n_b l_b; l_a l_b L | \xi(r) | \beta' n'_a l'_a, n'_b l'_b; l'_a l'_b L' \rangle \delta_{LL'}. \end{aligned} \quad (16)$$

把 $\xi(r)$ 按 Legendre 多项式展开,利用球函数的加法定理得

$$\xi(r) = \sum_{k=0}^{\infty} \xi_k(r_a, r_b) (\mathbf{C}_a^{(k)} \cdot \mathbf{C}_b^{(k)}), \quad (17)$$

$$\xi(r_a, r_b) = \frac{2k+1}{2} \int_{-1}^{+1} \xi(r) P_k(\cos \omega) d \cos \omega, \quad (18)$$

ω 是矢径 r_a 和 r_b 的夹角. 将(17)式代入(16)式得:

$$\begin{aligned} A_{LL'}(1) &= \frac{1}{2} \sqrt{L(L+1)(2L+1)} (-1)^{l_a+l_b-L} \delta_{LL'} \\ &\times \sum_{k=0}^{\infty} A^k W(l_a l_b l'_a l'_b; L k) \langle l_a \| C^{(k)} \| l'_a \rangle \langle l_b \| C^{(k)} \| l'_b \rangle. \end{aligned} \quad (19)$$

径向积分 A^k 是

$$A^k = \langle \beta, n_a l_a, n_b l_b | \xi_k(r_a, r_b) | \beta', n'_a l'_a, n'_b l'_b \rangle. \quad (20)$$

(2) 第二项

利用(8)式得

$$\begin{aligned} A_{LL'}(2) &= \frac{\sqrt{2}}{2} \langle \beta, n_a l_a, n_b l_b; l_a l_b L | \xi(r) \\ &\times r_b [\mathbf{C}_b^{(1)} \times \nabla_a^{(1)}]^{(1)} | \beta', n'_a l'_a, n'_b l'_b; l'_a l'_b L' \rangle \\ &= \frac{\sqrt{2}}{2} \sum_{l'_a l'_b} \langle \beta, n_a l_a, n_b l_b | \{ \langle l_a l_b L | r_b \xi(r) \| l'_a l'_b L' \rangle \\ &\times \frac{1}{\sqrt{2L+1}} \langle l'_a l'_b L | [\mathbf{C}_b^{(1)} \times \nabla_a^{(1)}]^{(1)} \| l'_a l'_b L' \rangle \} | \beta', n'_a l'_a, n'_b l'_b \rangle \\ &= \frac{\sqrt{2}}{2} \langle \beta, n_a l_a, n_b l_b | \left\{ \langle l_a l_b L M_L | \sum_{l'_a l'_b} r_b \sum_{k=0}^{\infty} \xi_k(r_a, r_b) \right. \\ &\times (\mathbf{C}_a^{(k)} \cdot \mathbf{C}_b^{(k)}) | l'_a l'_b L M_L \rangle \\ &\times \langle l'_a l'_b L | [\mathbf{C}_b^{(1)} \times \nabla_a^{(1)}]^{(1)} \| l'_a l'_b L' \rangle \left. \right\} | \beta', n'_a l'_a, n'_b l'_b \rangle \\ &= \frac{\sqrt{2}}{2} \langle \beta, n_a l_a, n_b l_b | \sum_{k=0}^{\infty} r_b \xi_k(r_a, r_b) \sum_{l'_a l'_b} (-1)^{l_a+l'_b-L} \\ &\times \langle l_a \| C^{(k)} \| l'_a \rangle \langle l_b \| C^{(k)} \| l'_b \rangle W(l_a l_b l'_a l'_b; L k) \\ &\times (-1)^{l'_a} \langle l'_a \| \nabla^{(1)} \| l'_a \rangle \langle l'_b \| C^{(1)} \| l'_b \rangle [(2L+1)(2L'+1)3]^{\frac{1}{2}} \\ &\times \begin{Bmatrix} l'_a & l'_a & 1 \\ l'_b & l'_b & 1 \\ L & L' & 1 \end{Bmatrix} | \beta', n'_a l'_a, n'_b l'_b \rangle. \end{aligned} \quad (21)$$

上式的 $9j$ 符号是由于计算两个张量算符的张量积的约化矩阵元而出现的(参看[4] p. 110).

(3) 第三项

第三项 $A_{LL'}(3)$ 的求法和第二项相同, 结果如下:

$$\begin{aligned}
A_{LL'}(3) &\equiv \frac{\sqrt{2}}{2} \langle \beta, n_a l_a, n_b l_b; l_a l_b L | \xi(r) \\
&\quad \times r_a [C_a^{(1)} \times \nabla_b^{(1)}]^{(1)} | \beta', n'_a l'_a, n'_b l'_b; l'_a l'_b L' \rangle \\
&= \frac{\sqrt{2}}{2} \langle \beta, n_a l_a, n_b l_b | \sum_{k=0}^{\infty} r_a \xi_k(r_a, r_b) \sum_{l'_a l'_b} (-1)^{l'_a + l'_b - L} \\
&\quad \times \langle l_a \| C^{(k)} \| l'_a \rangle \langle l_b \| C^{(k)} \| l'_b \rangle W(l_a l_b l'_a l'_b; L k) \\
&\quad \times \langle l'_a \| C^{(1)} \| l'_a \rangle \langle l'_b \| \nabla^{(1)} \| l'_b \rangle [(2L+1)(2L'+1)3]^{1/2} \\
&\quad \times \begin{Bmatrix} l'_a & l'_a & 1 \\ l'_b & l'_b & 1 \\ L & L' & 1 \end{Bmatrix} | \beta', n'_a l'_a, n'_b l'_b \rangle. \tag{22}
\end{aligned}$$

将梯度公式(11)代入 $A_{LL'}(2)$ 和 $A_{LL'}(3)$ 中,这两项可以合并为一项,再加上第一项,最后就得到了 LS 耦合表象中两体自旋轨道相互作用算符矩阵元的显表示式为

$$\begin{aligned}
&\langle \gamma, l_a l_b(L) s s(S) J M | \xi(r) \mathbf{L}_R \cdot \mathbf{S} | \gamma', l'_a l'_b(L') s s(S') J M \rangle \\
&= \frac{\sqrt{6}}{2} (-1)^{l'+j+l'_a+l'_b} \sqrt{2L+1} \begin{Bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ L & L' & J \end{Bmatrix} \delta_{s,s'} \delta_{s,1} \\
&\quad \times \sum_{k=0}^{\infty} \left[\sqrt{L(L+1)} \begin{Bmatrix} l_a & l_b & L \\ l'_b & l'_a & k \end{Bmatrix} \langle l_a \| C^{(k)} \| l'_a \rangle \langle l_b \| C^{(k)} \| l'_b \rangle A^k \delta_{LL'} \right. \\
&\quad \left. + \sqrt{6(2L'+1)} \sum_{l'_a l'_b} \begin{Bmatrix} l_a & l_b & L \\ l'_b & l'_a & k \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} l'_a & l'_a & 1 \\ l'_b & l'_b & 1 \\ L & L' & 1 \end{Bmatrix} \right. \\
&\quad \times \langle l_a \| C^{(k)} \| l'_a \rangle \langle l_b \| C^{(k)} \| l'_b \rangle \langle l'_a \| C^{(1)} \| l'_a \rangle \langle l'_b \| C^{(1)} \| l'_b \rangle \\
&\quad \left. \times (D^k + C^{l'_a l'_a} B_1^k - C^{l'_b l'_b} B_2^k) \right]. \tag{23}
\end{aligned}$$

上面的径向积分是

$$D^k = \left\langle \beta, n_a l_a, n_b l_b \left| \xi_k(r_a, r_b) \left(r_b \frac{\partial}{\partial r_a} - r_a \frac{\partial}{\partial r_b} \right) \right| \beta', n'_a l'_a, n'_b l'_b \right\rangle, \tag{24}$$

$$B_1^k = \left\langle \beta, n_a l_a, n_b l_b \left| \xi_k(r_a, r_b) \frac{r_b}{r_a} \right| \beta', n'_a l'_a, n'_b l'_b \right\rangle, \tag{25}$$

$$B_2^k = \left\langle \beta, n_a l_a, n_b l_b \left| \xi_k(r_a, r_b) \frac{r_a}{r_b} \right| \beta', n'_a l'_a, n'_b l'_b \right\rangle, \tag{26}$$

A^k 由(20)式定义.

(23)式就是我们所要推导的最后结果. 现在让我们把这个公式同 Hope-Longdon 公式作一比较(见[2]的(16)式及有关各式. 在[2]中引入了同位旋,我们没有引入. 如果要考虑同位旋,就要添上相应的因子,但对问题的实质没有影响),不过他们所用的符号和本文的不同. 如果化为同样的符号(可参看文献[4]和[5]中有关的关系式),就会看到,本文的公式比 Hope-Longdon 公式简单之处就是第二项(第一项没有简化,但这一项本身已很简单,没有第二项那么复杂). 文献[2]中(16)式第二项对 xy 的求和相当于本文(23)式第二项对 $l'_a l'_b$ 的求和,而符号 $\Theta(l_a l_b l'_a l'_b; LL'; xy; k111)$ 中所包含的一个 $6j$ 符号和一个 $9j$

符号同本文(23)式第二项中的 $6j$ 符号和 $9j$ 符号不一样, 该处的径向积分 J^k 、 C^k 和 D^k 相当于本文的 D^k 、 B_2^k 和 B_1^k 。主要的差异不在这些地方, 而在于 C^k 和 D^k 的相乘因子 $P(a, b, c)$, 这是一个包含有四个 $3j$ 符号(其中两个是倒数)和两个 $6j$ 符号的复杂的求和项(其实用不着变换符号, 我们在文献[2]的 $P(a, b, c)$ 的表示式中也能够看出它是很复杂的求和项), 而在本文(23)式中, 这样复杂的因子没有出现了, 代替它的是 $C^{l''l'}$ (即 B_1^k 和 B_2^k 的系数), 由(12)式看出, 这是很简单的因子, 比 $P(a, b, c)$ 简单得多了, 这就是两种公式的最主要的不同之处。

总起来说, 两种公式是有差别的, 本文的公式比 Hope-Longdon 公式要简单, 因而在实际运用时也比较方便。

在实际应用中, 经常遇到粒子 a 和粒子 b 是全同的同科粒子的特殊情况, 这时

$$n_a = n_b = n'_a = n'_b = n, \quad l_a = l_b = l'_a = l'_b = l, \quad (27)$$

在这种情况下, (23)式大为简化:

$$\begin{aligned} & \langle \gamma, l(L)ss(S)JM | \xi(r) \mathbf{L}_R \cdot \mathbf{S} | \gamma, l(L')s's'(S')JM \rangle \\ &= \frac{\sqrt{6}}{2} (-1)^{l+J} (2l+1)^2 \sqrt{2L+1} \begin{Bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ L & L & J \end{Bmatrix} \delta_{s,s'} \delta_{s,1} \delta_{L,L'} \\ & \times \sum_{k=0}^{\infty} (F_L^k + G_L^k). \end{aligned} \quad (28)$$

其中

$$\begin{aligned} F_L^k &= \sqrt{L(L+1)} \begin{Bmatrix} l & l & L \\ l & l & k \end{Bmatrix} \begin{pmatrix} l & k & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 A^k; \\ G_L^k &= 2[6(2L+1)l(l+1)(2l-1)(2l+3)]^{\frac{1}{2}} \begin{Bmatrix} l+1 & l & 1 \\ l-1 & l & 1 \\ L & L & 1 \end{Bmatrix} \\ & \times \begin{Bmatrix} l & l & L \\ l+1 & l-1 & k \end{Bmatrix} \begin{pmatrix} l & k & l-1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & k & l+1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} B^k. \end{aligned} \quad (29)$$

$$\quad \quad \quad (30)$$

径向积分

$$B_1^k = B_2^k = B^k, \quad (31)$$

$$D^k = 0. \quad (32)$$

以上的矩阵元都是在 LS 耦合表象中计算的, 在 jj 耦合表象中的矩阵元, 只须利用角动量的再耦合系数作一变换, 就可以从 LS 耦合表象中的公式得到。

当径向波函数是谐振子波函数时, 可以用 Talmi 的变换方法计算^[6]。本文的公式是普遍公式, 对任何径向波函数都适用。

参 考 文 献

- [1] M. A. Preston and R. K. Bhaduri, "Structure of the Nucleus", (1975); 李友松、陈创天、张志广、孙洪洲, 北京大学学报(自然科学版), 8 (1962), 149;
S. T. Hsieh, T. Y. Lee and C. T. Chen, *Phys. Rev.*, C4 (1971), 105.
- [2] J. Hope and L. W. Longdon, *Phys. Rev.*, 102 (1956), 1124.
- [3] G. Racah, *Phys. Rev.*, 62 (1942), 438.

- [4] A. R. Edmonds, *Angular Momentum in Quantum Mechanics*, 2nd ed. (1960).
[5] J. Hope and L. W. Longdon, *Phys. Rev.*, **101** (1956), 710.
[6] I. Talmi, *Helv. Phys. Acta*, **25** (1952), 194. V. V. Balashov and V. A. Eltekov, *Nucl. Phys.*, **16** (1960), 423; M. Moshinsky, *Nucl. Phys.*, **13** (1959), 104.

THE FORMULAS OF MATRIX ELEMENTS OF THE TWO-BODY SPIN-ORBIT INTERACTION

ZHANG QING-YING
(*Hunan University*)

ABSTRACT

In this paper, we derived the general formulas for the matrix elements of the two-body spin-orbit interaction between two particles in the shell model. The formulas, which we derived, are simpler than that of J. Hope and L. W. Longdon's.