ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

Р5 - 3477

И. Бланк

ВЫЧИСЛЕНИЕ КОЭФФИЦИЕНТОВ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ МОШИНСКОГО

ЛАБОРАТОРИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

1967 г.

P5 - 3477

И. Бланк

ВЫЧИСЛЕНИЕ КОЭФФИЦИЕНТОВ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ МОШИНСКОГО

Многие расчеты по ядерной физике (оболоченая модель с остаточным взаимодействием, метод Хартри-Фока, применение матрицы реакции Бракнера в конечных ядрах) имеют одну общую часть: введение модели независимых частиц и последующее вычисление матричных элементов двухчастичного оператора, который с некоторой точностью описывает нуклон-нуклонное взаимодействие, в представлении одночастичных функций модели. Ввиду того, что оператор взаимодействия зависит только от относительных координат пары нуклонов, для вычисления матричного элемента удобно перейти в систему центра масс (ц.м.). Однако это приводит к упрощению только в том случае, когда оператор Гамильтона для пары частиц в данном внешнем поле допускает разделение переменных в системе ц.м. Как показал Талми /1/, этому требованию удовлетворяет только потенциал гармонического осциллятора. Формулы, по которым связаны волновые функции гармонического осциллятора в лабораторной и ц.м. системах, были получены Мошинским /2/. Чтобы избавиться от зависимости на проекциях, вводится представление, где моменты количества движения пары частиц связаны на общий момент $\vec{\lambda} = \vec{\ell}_1 + \vec{\ell}_2$. Итак, мы имеем в лаб. системе собственные векторы $|n_1 \ell_1, n_2 \ell_2, \lambda\mu>$, а в ц.м. системе $|n\ell, NL, \lambda\mu>$ ($n_1 n_2$, n, N – радиальные квантовые числа соответственно первой и второй частиц, относительного движения и движения ц.м., ℓ_1, ℓ_2, ℓ, L – квантовые числа моментов количества движения в том же порядке, μ – проекция полного момента количества движения λ). Обе эти системы векторов являются собственными векторами оператора λ^2 и его проекции и, следовательно, существует унитарное преобразование, коэффициенты которого не зависят от μ (ср. /3/), связывающее эти две системы:

$$|n_1\ell_1, n_2\ell_2; \lambda\mu> = \sum_{n\ell NL} <n\ell, NL, \lambda | n_1\ell_1 n_2\ell_2 \lambda> \times |n\ell, NL, \lambda\mu> . \qquad (1)$$

Ввиду того, что обе системы векторов являются тоже собственными векторами оператора полной энергии, в сумме (1) индексы ограничены требованием $2n_1+\ell_1+2n_2+\ell_2 = 2n+\ell+2N+L$. (В дальнейшем будем величину $<\mathbf{I}>$ в (1) называть просто M-скобкой).

В работе[2] дана общая формула для M-скобки для $n_1=n_2=0$ и получено рекуррентное соотношение, по которому можно получить M-скобки с n_1+1, n_2+1, если известны все скобки с n_1, n_2. На основе этих формул Броди и Мошински издали таблицы[4], в которых приводятся все M-скобки, индексы которых удовлетворяют ограничениям $2n_1+\ell_1 \le 6$, $2n_2+\ell_2 \le 6$. Там содержатся также формулы, которые указывают симметрию скобок относительно разных перестановок индексов и приводятся подробные формулы для вычисления матричных элементов нуклон-нуклонного взаимодействия (включая нецентральные члены) при помощи M-скобок.

Явные формулы для M-скобок были получены и другими авторами, например, Кауфманном и Ноаком[5], которые рассмотрели M-скобки на основе теории групп; Баранже и Дэвис[6] для проверки расчетов по методу Хартри-Фока получили простые формулы для малых значений ℓ.

Для расчетов, которые проводились автором по вычислению матрицы реакции Бракнера в легких ядрах, оказалось, что применение таблиц[4] не совсем удобно по нескольким причинам.

1. M-скобки зависят от 9 параметров и, следовательно, искать их в таблицах довольно сложно.

2. При использовании ЭВМ M-скобки занимают много места в памяти машины и нужно пользоваться сложной программой искания.

3. Для многих расчетов требуются M-скобки с такими значениями параметров, которых в таблицах нет.

В связи с этим необходимо иметь программу, которая позволяет вычислять довольно быстро все скобки без ограничения значений параметров. Такую программу удобно составить на основе формул, полученных Бринком[7]. Основной

идеей является известный факт, что оператор Гамильтона H гармонического осциллятора можно выразить в виде суммы трех операторов, каждый из которых имеет вид $a_i^+ a_i$ и, следовательно, его можно рассматривать как оператор числа частиц (операторы a_i, a_i^+ удовлетворяют перестановочным соотношениям для бозонов $[a_i, a_j^+] = \delta_{ij}$).

Обозначая вектор основного состояния осциллятора как $|0>$ (вакуум), получаем следующие нормированные собственные векторы

$$|n_i, n_j, n_k> = \frac{1}{\sqrt{n_i!\, n_j!\, n_k!}} (a_i^+)^{n_i} (a_j^+)^{n_j} (a_k^+)^{n_k} |0> .$$

Если выбрать операторы a_i $(i = -1, 0, 1)$ в виде

$$a_1 = -\frac{1}{\sqrt{2}}(a_x - i a_y), \quad a_0 = a_z, \quad a_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_x + i a_y),$$

где

$$\vec{a} = (a_x, a_y, a_z) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,\vec{r} + i\sqrt{\frac{1}{m\omega\hbar}}\,\vec{p}\right),$$

то

$$H = \hbar\omega\left(a_1^+ a_1 + a_0^+ a_0 + a_{-1}^+ a_{-1} + \frac{3}{2}\right)$$

и z-компонента оператора момента количества движения

$$\ell_z = \hbar(a_1^+ a_1 - a_{-1}^+ a_{-1})$$

и, следовательно, векторы $|n_1, n_0, n_{-1}>$ являются одновременно собственными векторами оператора H и оператора ℓ_z (собственное значение $\hbar(n_1 - n_{-1})$, т.е. $m = n_1 - n_{-1}$) и их можно поэтому характеризовать квантовыми числами ν (энергия), m и некоторым третьим квантовым числом p (например, $p = n_{-1}$), т.е.

$$|n_1, n_0, n_{-1}> = |\nu - m - 2p, m+p, p> .$$

В силу вышесказанного, между собственными векторами H, соответствующими сферическим координатам, и векторами $|\nu - m - 2p, m+p, p>$ существует соотношение

$$|n\ell m> = \sum_p A_{\ell p}^{nm} |2n+\ell-m-2p, m+p, p> (-1)^n .$$

Для коэффициентов $A^{nm}_{\ell p}$ Бринк получил

$$A^{nm}_{\ell p} = \sqrt{\frac{(2\ell+1)\,2^{2p-m-\ell}(n+\ell)!\,(\ell-m)!(\ell+m)!(2n+\ell-m-2p)!\,p!\,n!}{(2n+2\ell+1)!}}\times \tag{2}$$

$$\times\sqrt{(m+p)!}\sum_{r=\max(0,-m,p-n)}^{\min(p,[\frac{\ell-m}{2}])}\frac{(-1)^{r+p}}{2^{2r}(n+r-p)!\,(p-r)!\,(\ell-m-2r)!\,(m+r)!\,r!}$$

Для вычисления M-скобок переходим опять к разделенному представлению $|n_1\ell_1 m_1, n_2\ell_2 m_2\rangle$ и, используя свойства коэффициентов Клебша, получаем

$$\langle n\ell, NL, \lambda | n_1\ell_1, n_2\ell_2, \lambda\rangle\,(\ell_1 m_1 \ell_2 m_2 | \lambda\, m_1+m_2) =$$

$$\sum_{m+M=m_1+m_2}(\ell m L M|\lambda\, m+M)\sum_{pPp_1p_2}A^{n_1m_1}_{\ell_1p_1}A^{n_2m_2}_{\ell_2p_2}A^{nm}_{\ell p}A^{NM}_{LP}\times$$

$$(-1)^{n_1+n_2+n+N}\times\{\nu_1-m_1-2p_1,\, m_1+p_1,\, p_1,\, \nu_2-m_2-2p_2,\, m_2+p_2,\, p_2|$$

$$\nu-m-2p,\, m+p,\, p,\, \bar\nu-M-2P,\, M+P,\, P\}$$ где $\nu_1 = 2n_1+\ell_1$ ... и т.д.

Осталось найти формулу для { } скобки. Заметим, что при переходе от лабораторной системы $(\vec r_1, \vec r_2)$ в систему ц.м. $(\vec r, \vec R)$ импульсы преобразуются тем же образом, что и координаты и, следовательно, то же относится к выражению операторов $a_i^{(rel)}$, $a_i^{(CM)}$ при помощи $a_i^{(1)}$, $a_i^{(2)}$. Из перестановочных соотношений для $\vec a^{(1)}$, $\vec a^{(2)}$ вытекает, что компоненты всех операторов $\vec a^{(1)}, \vec a^{(2)}, \vec a^{(rel)}, \vec a^{(CM)}$ коммутируют, если $i \neq j$ и поэтому { }-скобка распадается на произведение трех сомножителей, которые зависят от индексов одинаковым образом

$$\{\nu_1-m_1-2p_1,\, m_1+p_1,\, p_1,\, \nu_2-m_2-2p_2,\, m_2+p_2,\, p_2 | \nu-m-2p,\, m+p,\, p,$$

$$\bar\nu-M-2P,\, M+P,\, P\} = B_{\nu_1-m_1-2p_1,\,\nu_2-m_2-2p_2,\,\nu-m-2p,\,\bar\nu-M-2P}\times \tag{3}$$

$$B_{m_1+p_1,\, m_2+p_2,\, m+p,\, M+P}\times B_{p_1,\, p_2,\, p,\, P}\,.$$

где

$$B_{p_1p_2pP} = \sqrt{\frac{p_1!\,p_2!\,p!\,P!}{2^{p+P}}}\sum_{r=\max(0,p-p_1)}^{\min(p,p_2)}\frac{(-1)^r}{(p_1-p+r)!\,(p_2-r)!\,(p-r)!\,r!}\,.$$

Итак, окончательно, формула для M-скобок имеет вид

$$\langle n\ell, NL, \lambda | n_1\ell_1, n_2\ell_2, \lambda\rangle\,(\ell_1 m_1 \ell_2 m_2 | \lambda\, m_1+m_2) =$$

$$= \sum_{m+M=m_1+m_2}(\ell m L M|\lambda\, m+M)\sum_{pPp_1p_2}A^{n_1m_1}_{\ell_1p_1}A^{n_2m_2}_{\ell_2p_2}A^{nm}_{\ell p}A^{NM}_{LP}\times \tag{4}$$

$$\times(-1)^{n_1+n_2+n+N}\,B_{\nu_1-m_1-2p_1,\,\nu_2-m_2-2p_2,\,\nu-m-2p,\,\bar\nu-M-2P}\,B_{m_1+p_1,\,m_2+p_2,\,m+p,\,M+P}\times$$

$$\times B_{p_1p_2pP}\,; \qquad \nu_1 = 2n_1+\ell_1\,;\ \nu_2 = 2n_2+\ell_2\,;\ \nu = 2n+\ell\,;\ \bar\nu = 2N+L.$$

В приложении приводится алгоритм для вычисления M-скобок методом Бринка (формула 4)). Он отличается от алгоритма в /7/ в основном в двух пунктах:

1) ввиду того, что M-скобка не зависит от m_1, m_2, можно выбрать любые значения этих параметров с условием, что соответствующий коэффициент Клебша будет ненулевым. Удобным оказывается набор $m_1 = \ell_1$, $m_2 = \lambda-\ell_1$. В таком случае можно применить специальную формулу, которая намного проще, чем общая формула для коэффициентов Клебша (ср. /3/ – (3.6.6)):

$$(\ell_1\ell_1\ell_2\,\lambda-\ell_1|\lambda\lambda) = \sqrt{\frac{(2\ell_1)!\,(2\lambda+1)!}{(\ell_1+\ell_2+\lambda+1)!\,(\ell_1-\ell_2+\lambda)!}} \tag{5}$$

В формуле (4) кроме того встречаются коэффициенты Клебша в сумме по m и они для сделанного выбора параметров $m_1+m_2=\lambda$ имеют вид $(\ell m L\,\lambda-m|\lambda\lambda)$. Их тоже можно вычислить, не используя общую формулу (срв. /3/ – (3.6.13))

$$(\ell m L \lambda - m | \lambda \lambda) = (-1)^{\ell+m} (\lambda \lambda L m - \lambda | \ell m) \sqrt{\frac{2\lambda+1}{2\ell+1}} =$$

$$= (-1)^{\ell+m} \sqrt{\frac{(2\lambda+1)!(\ell+L-\lambda)!(\lambda+L-m)!(\ell+m)!}{(\lambda+L-\ell)!(\lambda-L+\ell)!(\lambda+L+\ell+1)!(L-\lambda+m)!(\ell-m)!}} . \tag{6}$$

Применение этого способа вычисления встречающихся в (4) коэффициентов Клебша экономит память и сокращает время счета.

2) Заменяя все факториалы, встречающиеся в M-скобке, выражениями $f_n = \frac{n!}{d^n}$, где d – целое число ≥ 1, мы получаем, подставляя в (4) выражения (5), (6):

$$\langle n\ell, NL, \lambda | n_1\ell_1, n_2\ell_2, \lambda \rangle = \frac{1}{d^2} \langle n\ell, NL, \lambda | n_1\ell_1, n_2\ell_2, \lambda \rangle_{(d)} , \tag{7}$$

где $\langle n\ell, NL, \lambda | n_1\ell_1, n_2\ell_2, \lambda \rangle_{(d)}$ обозначает M-скобку, в которой все факториалы заменены выражением $\frac{n!}{d^n}$.

Использование свойства (7) имеет большое практическое значение, так как на машинах типа М-20 вычисление (20)! уже вызывает переполнение и, таким образом, без применения (7) значения параметров ограничены требованием, чтобы самый большой факториал, встречающийся в M-скобке, был меньше (20)!. Кроме того, даже при соблюдении этого условия числа порядка (17)! (18)! и т.д. очень велики и при численном счете может сильно понижаться точность. Эти все трудности можно устранить подходящим выбором значения d.

Программа, которая приводится в приложении, проверялась вычислением примерно 50 M-скобок с такими параметрами, чтобы можно было сравнивать их с таблицами [4], для значений $d = 4$ и $d = 6$. В обоих случаях получилось совпадение с табличными значениями у всех вычисленных скобках на 7 цифр после запятой. Для вычисления одной скобки понадобилась примерно 1 секунда машинного времени. Однако время счета очень сильно зависит от значений параметров. Например, вычислялись все скобки с $2n_1+\ell_1+2n_2+\ell_2=12$ и при этом затраты времени на одну скобку в среднем составляют 5-10 сек.

Автор благодарен Я. Визнеру за помощь при составлении начального варианта программы.

Приложение

Алгоритм для счета M-скобки $\langle n\ell, NL, \lambda | n_1\ell_1, n_2\ell_2, \lambda \rangle$ оформлен в виде процедуры – функции с 11 параметрами. Первые 9 из них – это целочисленные параметры скобки в порядке $n, \ell, N, L, \lambda, n_1, \ell_1, n_2, \ell_2$. Следующий параметр (целочисленный) – это величина d (ср. (7)). Эти 10 параметров входят в список значений. 11 параметр – идентификатор массива. Фактический параметр, который ему соответствует при любом вызове процедуры, должен быть идентификатором массива с нижней границей 0 и верхней границей, которая не меньше числа $\max(2n+2\ell+1, 2N+2L+1, 2n_1+2\ell_1+1, 2n_2+2\ell_2+1)$. (Оценку этой границы нужно провести заранее согласно максимальным значениям параметров, с которыми хотим вызывать процедуру). Элементам массива должны быть присвоены значения $\frac{n!}{d^n}$ $(n = 0, 1, 2, ..)$ и это присвоение должно быть сделано до первого вызова процедуры, причем при всех последующих вызовах десятый параметр процедуры должен равняться тому значению d, с которым считались элементы массива.

Процедура проверяет выполнение следующих условий:

1) Первые 9 параметров неотрицательные числа (но не проверяется целочисленность).

2) $|\ell - L| \leq \lambda \leq \ell + L$, $|\ell_1 - \ell_2| \leq \lambda \leq \ell_1 + \ell_2$

3) $2n + \ell + 2N + L = 2n_1 + \ell_1 + 2n_2 + \ell_2$.

Если хотя бы одно из этих условий не выполняется, то значение процедуры =0.

При использовании трансляторов ТА-1 или ТА-1М рекомендуется работать с включенным 43-разрядом ДЗУ- IV, чтобы процедуры фиксировались на РП, иначе время счета удлиняется. Общая длина процедуры и в ней содержащихся процедур A, B равна $(1662)_8 = 747 + 412 + 241$ на ТА-1 или $(1244)_8 = 605 + 156 + 161$ на ТА-1М.

```
real procedure BM (p, ℓ, P, L, ℓa, p1, ℓ1, p2, ℓ2, d, f) ;
value p, ℓ, P, L, ℓa, p1, ℓ1, p2, ℓ2, d ;
integer p, ℓ, P, L, ℓa, p1, ℓ1, p2, ℓ2, d ; array f ;
begin real term, sum, s, sum1, sum2, a1, a2, t ;
integer m, mmin, q1, q2, q, Q, n1, n2, n, N, m1, m2, M, max2, max ;
real procedure A(p, m, ℓ, n) ; value p, m, ℓ, n ; integer p, m, ℓ, n ;
begin real term, sum; integer r, rmin, rmax ;
rmin:= if m<0 then −m else 0 ; if rmin<n−p then rmin:=n−p ;
rmax:= if n<(ℓ−m)÷2 then n else (ℓ−m)÷2 ;
r:=rmin; term:=sum:=(if r+n=2×((r+n)÷2) then 1 else −1)/
(2↑(2×r)×f[p+r−n]×f[n−r]×f[ℓ−m−2×r]×f[m+r]×f[r]) ;
for r:=rmin+1 step 1 until rmax do
begin term:=−term×(n−r+1)×(ℓ−m−2×r+2)×(ℓ−m−2×r+1)/(4×(p+r−n)
×(m+r)×r) ; sum:=term+sum end r ;
A:=sqrt(2↑(2×n+ℓ−m)×(2×ℓ+1)×f[p+ℓ]×f[ℓ−m]×f[ℓ+m]×
f[2×p+ℓ−m−2×n]×f[m+n]×f[n]×f[p]/(f[2×p+2×ℓ+1]×d))×sum
end A ;
real procedure B(n1, n2, n, N) ; value n1, n2, n, N ; integer n1, n2, n, N ;
begin real term, sum; integer r, rmin, rmax;
rmin:= if n−n1>0 then n−n1 else 0; rmax:= if n<n2 then n else n2 ;
r:=rmin; term:=sum:=(if r=2×(r÷2) then 1 else −1)/(f[n1−n+r]×
f[n2−r]×f[n−r]×f[r]) ; for r:=rmin+1 step 1 until rmax do
begin term:=−term/(n1−n+r)×(n2−r+1)×(n−r+1)/r ;
sum:=term+sum end r ;
B:=sqrt(f[n1]×f[n2]×f[n]×f[N]/2↑(n+N))×sum end B ;
if p≥0 and ℓ≥0 and P≥0 and L≥0 and ℓa≥0 and p1≥0 and ℓ1≥0
and p2≥0 and ℓ2≥0 and abs(ℓ−L)≤ℓa and ℓa≤ℓ+L and abs(ℓ1−ℓ2)≤ℓa
and ℓa≤ℓ1+ℓ2 and 2×p+ℓ+2×P+L=2×p1+ℓ1+2×p2+ℓ2 then
begin mmin:= if ℓa−L>−ℓ then ℓa−L else −ℓ ; m:=mmin ;
term:=(if m=2×(m÷2) then 1 else −1)×sqrt(f[ℓa+L−m]×f[ℓ+m]/
(f[L−ℓa+m]×f[ℓ−m])) ; q1:=2×p1+ℓ1 ; q2:=2×p2+ℓ2 ; Q:=2×P+L ;
q:=2×p+ℓ ; m1:=ℓ1 ; m2:=ℓa−ℓ1 ; max2:=(q2−m2)÷2 ; sum1:=0 ;
for n1:=0 step 1 until p1 do begin sum2:=0 ; a1:=A(p1, m1, ℓ1, n1) ;
for n2:= if m2<0 then −m2 else 0 step 1 until max2 do
begin s:=0 ; a2:=A(p2, m2, ℓ2, n2) ; t:=term ;
for m:=mmin step 1 until ℓ do
begin max:=(q−m)÷2 ; M:=ℓa−m ; if m>mmin then t:=−t×sqrt((ℓ+m)×(ℓ−m+1)/
((L−ℓa+m)×(ℓa+L−m+1))) ; sum:=0 ;
```



```
for n:= if m<0 then −m else 0 step 1 until max do
begin N:=n1+n2−n ; if N≥0 and M+N≥0 and Q−M−2×N≥0 then
sum:=sum+a1×a2×A(p,m,ℓ,n)×A(P,M,L,N)×B(n1,n2,n,N)×
B(q1−m1−2×n1, q2−m2−2×n2, q−m−2×n, Q−M−2×N)×
B(m1+n1, m2+n2, m+n, M+N) end n ; s:=s+t×sum end m ; sum2:=sum2+s end ;
sum1:=sum1+sum2 end n1 ; BM:=(if p1+p2+p+P+ℓ=2×((p1+p2+p+P+ℓ)÷2)
then 1 else −1)×sqrt(f[ℓ+L−ℓa]×f[ℓ1+ℓ2+ℓa+1]×f[ℓ1−ℓ2+ℓa]/
(f[ℓa+L−ℓ]×f[ℓa−L+ℓ]×f[ℓa+L+ℓ+1]×f[2×ℓ1]))×sum1 end
else BM:=0
end BM ;
```

Литература

1. I.Talmi, Helv. Acta Phys., XXV, 185 (1952).
2. Moshinsky M., Nucl.Phys., 13, 104 (1959).
3. Edmonds S., Angular Momentum in Quantum Mechanics, Princeton 1957.
4. Brody T., Moshinsky M., Tables of Transformation Brackets,Mexico,1960.
5. Kaufmann B., Noack B., Journ. Math. Phys., 6, 142 (1965).
6. Baranger M., Davies K., Nucl.Phys., 79, 403 (1966).
7. Brink D., Gunn J., Nordita ALGOL Prócedure Library-Moshinsky Transformation Brackets A.P.L.9, 1965.

Рукопись поступила в издательский отдел
11 августа 1967 г.