

文章编号: 1007-4627(2001)04-0261-05

量子 N 体系统的广义径向方程*

马中骥, 段 斌, 顾晓艳

(中国科学院高能物理研究所, 北京 100039)

摘 要: 介绍一种精确的方法, 在质心坐标系中, 把量子 N 体系统的整体转动自由度和内部运动自由度完全地分离开来. 对于确定的轨道角动量状态, 找到了一组完备且独立的角动量本征函数基. 它们是坐标分量的齐次多项式, 且满足 Laplace 方程. 系统中的任何角动量本征函数都可以用这组函数基展开, 组合系数只依赖于内部变量, 称为广义径向函数. 可以简单且明显地推导出广义径向函数所满足的广义径向方程. 函数和方程式都只依赖于 $(3N-6)$ 个内部变量, 而且个数是有限的.

关键词: 量子 N 体系统; 薛定谔方程; 广义径向方程

中图分类号: O562.1; O572.23 **文献标识码:** A

当把质心平动分离出去后, 在质心坐标系中, 量子 N 体系统有 $(3N-3)$ 个自由度. 由于系统各向同性, 系统整体转动自由度应该可以与内部自由度完全地分离开来, 得到仅依赖于 $(3N-6)$ 个内部变量的波函数和运动方程式. 这个问题在量子力学建立之初就有人开始研究, 提出了多种解决方案, 近年来还有人在继续努力作改进, 但似乎仍解决得不够理想. 本文试图用一种全新的思维来探讨此问题, 简单干净地解决系统整体转动自由度的分离问题.

氢原子问题是一个典型的量子二体问题, 在质心坐标系中, 氢原子可用相对坐标 $r=r_1-r_2$ 来描写. 由于空间转动不变性和角动量守恒, 波函数可分离变量

$$\Psi_m^l(r) = \Phi(r)Y_m^l(\theta, \varphi), \quad (1)$$

Schrödinger 方程简化为径向波函数 $\Phi(r)$ 所满足的径向方程. 它是常微分方程, 可以精确求解. 推广到量子 N 体系统, 最自然的方法就是找一组独立且完备的角动量本征函数, 代替球谐函数 $Y_m^l(\theta, \varphi)$, 得到广义径向函数和广义径向方程.

Wigner 用群论方法研究这一问题^[1]. 用转动矩阵 $R=R(\alpha, \beta, \gamma)$ 描写系统的整体转动. 它把质心坐标系转到固定在系统上的坐标系, 其中 α, β 和 γ 是

Euler 角. 设用一个字母 ξ 描写系统的 $(3N-6)$ 个内部变量, 它们在转动中保持不变, 因此有确定角动量的状态为 $\Psi_m^l(\alpha, \beta, \gamma, \xi) = \Psi_m^l(R, \xi)$. 经过简单的群论运算, 得到(见文献[1](19.6)式)

$$\begin{aligned} \Psi_m^l(\alpha, \beta, \gamma, \xi) \\ = \sum_{m=-l}^l D_{m, m}^l(\alpha, \beta, \gamma) \Phi_m^l(\xi). \end{aligned} \quad (2)$$

(2)式说明 $(2l+1)$ 个函数 $D_{m, m}^l(\alpha, \beta, \gamma) \Phi_m^l(\xi)$ 构成一组完备的角动量本征函数基. 任何角动量为 l 的本征函数都可按此函数基展开, 系数 $\Phi_m^l(\xi)$ 就是广义径向函数. Wigner 及其后继者在此基础上努力推导广义径向方程^[2,3], 但由于 Euler 角微分运算的复杂性, 得到的方程比较复杂, 沿此方向作数值计算也较困难.

目前对量子三体问题, 例如氢原子问题, 除了用变分法计算外, 用得最多的直接算法主要是改进的超球谐函数方法^[4-6]. 在此方法中, 角动量本征函数表为两个分角动量本征函数的乘积. 再用 Clebsch-Gordan 系数来组合. 因为分角动量一般不是好量子数, 所以对确定的角动量状态, 有无穷多个角动量本征函数基, 造成超球谐函数的不必要的简并. 近年也有些工作^[7-9]在固定于系统上的坐标系里, 把动能算符用分角动量算符和径向微商算符

收稿日期: 2001-09-11; 修改日期: 2001-10-17

* 基金项目: 国家自然科学基金资助项目(10075050); 博士后科学基金资助项目

作者简介: 马中骥(1940-), 男(汉族), 浙江余杭人, 研究员, 博士生导师, 从事理论物理研究.

表出, 它们依赖于 $(3N-6)$ 个内部变量. 这方法只能简化一些计算, 不能根本解决由于分角动量不守恒所造成的有无穷多个耦合角动量基的问题.

Eckart^[10] 提出一种称为主轴变换的方法, 把经典 N 体系统的转动自由度和内部自由度分离开来. 在质心坐标系中有 $(N-1)$ 个 Jacobi 坐标矢量 R_j ^[11], Eckart 引入一个 $(N-1) \times (N-1)$ 半正定的实对称矩阵 $\mathcal{R}_{jk} = R_j \cdot R_k$, 它可以通过实正交相似变换 X 对角化, $X\mathcal{R}X^{-1} = \Gamma$. 由此 Eckart 得到

$$R_j = \sum_{\alpha=1}^3 e_{\alpha} r_{\alpha} X_{\alpha j}, \quad 1 \leq j \leq N-1, \quad (3)$$

其中 e_{α} 是三个互相正交的单位矢量, 把它们作为列矢量可以构成一个实正交矩阵, 确定三个 Euler 角, 描写系统的整体转动, $r_{\alpha}^2 = \Gamma_{\alpha\alpha}$ 包含三个独立参数, 而 $X_{\alpha j}$ 是实正交矩阵 X 的前三行, 包含 $3(N-1)-6$ 个参数, 这 $(3N-6)$ 个参数描写系统的内部运动. Eckart^[10] 证明了在动能表达式中, Euler 角和内部变量完全分离, 而且不存在角速度的交叉项, 这说明转动坐标系正选在系统的瞬时惯量主轴上. Eckart 的研究被进一步发展并量子化^[12-14]. 这个方法的最大缺点是新的广义坐标与 Jacobi 坐标的关系式(3)只是原则上存在, 很难具体表出. 此外, 导出的广义径向方程也太复杂, 目前只具体推导出 5 个以下粒子系统的方程, 正如该文作者所说^[14], 可能由于计算错误, 六体系统的方程还没有得到.

我们从另一角度来推广氢原子问题中转动变量的分离方法. (1) 式中的球谐函数 $Y_m^l(\theta, \varphi)$ 是作为角动量算符 L^2 和 L_z 的共同本征函数引入的, 它明显地包含了转动变量 θ 和 φ . Wigner 方法中的函数基 $D_{mm}^l(\alpha, \beta, \gamma)$ 正是球谐函数 $Y_m^l(\theta, \varphi)$ 的直接推广. 函数基中明显地包含的 Euler 角, 增加了计算的困难. 在氢原子问题中, 球谐函数 $Y_m^l(\theta, \varphi)$ 也可以用球谐多项式 $\mathcal{Y}_m^l(r) = r^l Y_m^l(\theta, \varphi)$ 代替. 球谐多项式 $\mathcal{Y}_m^l(r)$ 是 r 的直角分量 (x, y, z) 的 l 次齐次多项式, 不明显地包含转动变量 θ 和 φ . 它除了作为角动量算符 L^2 和 L_z 的共同本征函数外, 还满足 Laplace 方程. 用球谐多项式作为函数基, 一样可以简单地导出径向方程. 设 $\Psi_m^l(r) = \{r^{-l}\Phi(r)\} \mathcal{Y}_m^l(r)$, 用 Laplace 算符作用, 得

$$\begin{aligned} \Delta \Psi_m^l(r) &= \mathcal{Y}_m^l(r) [\Delta r^{-l}\Phi(r)] + \\ & 2\nabla [r^{-l}\Phi(r)] \cdot \nabla \{\mathcal{Y}_m^l(r)\} \\ &= \mathcal{Y}_m^l(r) r^{-1} \Delta^2 r [r^{-l}\Phi(r)] + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & 2\Delta [r^{-l}\Phi(r)] r^{-1} r \cdot \nabla \{\mathcal{Y}_m^l(r)\} \\ &= Y_m^l(\theta, \varphi) \{r^{-1} \Delta^2 r \Phi(r) - \\ & l(l+1) r^{-2} \Phi(r)\}. \end{aligned}$$

计算结果是一样的, 但因为二体问题中关于 θ 和 φ 的微商并不难计算, 所以在传统的研究中不采用球谐多项式. 对量子 N 体系统, 从球谐多项式作推广可以避免与 Euler 角的微商相联系的复杂运算. 这正是本文要介绍的方法.

在质心坐标系中, 量子 N 体系统由 $(N-1)$ 个 Jacobi 坐标矢量 R_j ^[11] 描写. 任取其中两个 Jacobi 坐标矢量, 例如 R_1 和 R_2 , 由它们来确定固定在系统上的坐标系, 即取 z 轴沿 R_1 方向, 而让 R_2 处在 $x-z$ 平面的正 x 轴一侧. 选择 $(3N-6)$ 个在转动中保持不变的独立变量来描写系统的内部运动:

$$\begin{aligned} \xi_j &= R_j \cdot R_1, \quad \eta_j = R_j \cdot R_2, \quad \zeta_j = R_j \cdot (R_1 \times R_2) \\ 1 \leq j \leq (N-1), \quad \eta_1 &= \xi_2, \quad \zeta_1 = \zeta_2 = 0. \end{aligned} \quad (4)$$

请注意, ξ_j 和 η_j 有偶宇称, 而 ζ_j 有奇宇称. 在固定于系统上的坐标系里, R_1 只有 z 分量 $\xi_1^{1/2}$, 而 R_2 的 x 和 z 分量分别为 $(\Omega/\xi_1)^{1/2}$ 和 $\xi_2 \xi_1^{-1/2}$, 其中 $\Omega = \xi_1 \eta_2 - \xi_2^2$. 此坐标系与质心坐标系通过转动 $R(\alpha, \beta, \gamma)$ 联系起来:

$$\begin{aligned} R(\alpha, \beta, \gamma) &= \begin{pmatrix} c_{\alpha} c_{\beta} c_{\gamma} - s_{\alpha} s_{\gamma} & -c_{\alpha} c_{\beta} s_{\gamma} - s_{\alpha} c_{\gamma} & c_{\alpha} s_{\beta} \\ s_{\alpha} c_{\beta} c_{\gamma} + c_{\alpha} s_{\gamma} & -s_{\alpha} c_{\beta} s_{\gamma} + c_{\alpha} c_{\gamma} & s_{\alpha} s_{\beta} \\ -s_{\beta} c_{\gamma} & s_{\beta} s_{\gamma} & c_{\beta} \end{pmatrix}, \quad (5) \end{aligned}$$

其中 $c_{\alpha} = \cos \alpha$, $s_{\alpha} = \sin \alpha$ 等. 经过简单的计算得

$$\begin{aligned} e^{i\alpha} s_{\beta} &= \xi_1^{-1/2} X, \quad e^{i\alpha} (c_{\gamma} + i c_{\beta} s_{\gamma}) = -\Omega^{-1/2} Z, \\ e^{i\alpha} (c_{\beta} c_{\gamma} + i s_{\gamma}) &= -\xi_2 (\xi_1 \Omega)^{-1/2} X + (\xi_1 / \Omega)^{1/2} Y, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} X &= R_{1x} + iR_{1y}, \quad Y = R_{2x} + iR_{2y}, \\ Z &= XR_{2z} - R_{1z}Y, \\ Z^2 &= \eta_2 X^2 - 2\xi_2 XY + \xi_1 Y^2. \end{aligned} \quad (6)$$

现在回到找角动量本征函数基的问题上来. 由于系统各向同性, 为了简单起见, 从现在开始我们只讨论 L_z 取最大本征值的状态 ($m=l$), L_z 取其它本征值的状态可通过降算符 L_- 的作用得到. (2) 式表明, 对于角动量为 l 的状态, $(2l+1)$ 个函数 $D_{lm}^l(\alpha, \beta, \gamma)$ 构成一组完备的角动量本征函数基, 现在我们要把这组基组合成关于 Jacobi 坐标分量的齐次多项式的形式, 而且要求它们满足 Laplace 方程. (6) 式表明 Euler 角完全由 R_1 和 R_2 决定, 取关于 R_1 和

R_2 的球谐多项式, 用 Clebsch-Gordan 系数组合成角动量为 l 的本征状态:

$$\mathscr{D}_l^{\lambda l}(R_1, R_2) = \sum_m \mathscr{D}_m^{\lambda l}(R_1) \mathscr{D}_{l-m}^{\lambda l}(R_2) \cdot \langle q, m, L - q, l - m | l, l \rangle. \quad (7)$$

$\mathscr{D}_l^{\lambda l}(R_1, R_2)$ 是关于 Jacobi 坐标分量的 L 次齐次多项式, 而且满足 Laplace 方程. 取 $L = l + \lambda$, $\lambda = 0$ 或 1, 略去前面的常数因子, 得

$$Q_q^{\lambda l}(R_1, R_2) = C_l \mathscr{D}_l^{\lambda l + \lambda l q}(R_1, R_2) = \frac{X^{q-\lambda} Y^{l-q} Z^{\lambda}}{(q-\lambda)!(l-q)!}, \quad \lambda \leq q \leq l, \quad \lambda = 0, 1. \quad (8)$$

如果限制 Z 的幂次为 0 或 1, 则所有关于 X, Y 和 Z 的 l 次齐次多项式都可表为 $Q_q^{\lambda l}(R_1, R_2)$ 的线性组合, 而由 (6) 式, 所有关于 $e^{i\alpha s_{\beta}}, e^{i\alpha}(c_{\gamma} + ic_{\beta}s_{\gamma})$ 和 $e^{i\alpha}(c_{\beta}c_{\gamma} + is_{\gamma})$ 的 l 次齐次多项式也都可表为 $Q_q^{\lambda l}(R_1, R_2)$ 的组合, 组合系数只依赖于内部变量. 另一方面, 写出 Wigner D 函数的具体形式^[15], 当 $m \geq 0$ 时

$$D_{l, (\pm m)}^{\lambda}(\alpha, \beta, \gamma)^* = (-1)^{l-m} 2^{-l} \left[\frac{(2l)!}{(l+m)!(l-m)!} \right]^{1/2} (e^{i\alpha} s_{\beta})^{l-m} \cdot [e^{i\alpha}(c_{\gamma} + ic_{\beta}s_{\gamma}) \pm e^{i\alpha}(c_{\beta}c_{\gamma} + is_{\gamma})]^m. \quad (9)$$

可见 $D_{l, (\pm m)}^{\lambda}(\alpha, \beta, \gamma)^*$ 都可用 $Q_q^{\lambda l}(R_1, R_2)$ 的组合表出, 系数依赖于内部变量. $D_{l, (\pm m)}^{\lambda}(\alpha, \beta, \gamma)^*$ 与 $Q_q^{\lambda l}(R_1, R_2)$ 的关系类似于球谐函数 $Y_l^m(\theta, \varphi)$ 与球谐多项式 $\mathscr{D}_l^m(r)$ 的关系, 因此我们把 $Q_q^{\lambda l}(R_1, R_2)$ 称为广义谐和多项式. 对量子二体系统, 角动量本征函数基只有一个, 而对量子 N 体系统, 角动量本征函数基有 $(2l+1)$ 个.

我们已经证明了 $(2l+1)$ 个函数 $Q_q^{\lambda l}(R_1, R_2)$ 构成一组完备的角动量为 l 的本征函数基, N 体系统中任何角动量为 l 和宇称为 $(-1)^{l-\lambda}$ 的本征函数 $\Psi_l^{\lambda l}(R_1, \dots, R_{N-1})$ 都可用这组函数基 $Q_q^{\lambda l}(R_1, R_2)$ 展开, 展开系数 $\psi_{qr}^{\lambda l}(\xi, \eta, \zeta)$ 是 $(3N-6)$ 个内部变量的函数, 称为广义径向函数:

$$\begin{aligned} \Psi_l^{\lambda l}(R_1, \dots, R_{N-1}) &= \sum_{r=0}^l \sum_{q=r}^l \psi_{qr}^{\lambda l}(\xi, \eta, \zeta) Q_q^{\lambda l}(R_1, R_2), \\ \psi_{qr}^{\lambda l}(\xi, \eta, \zeta) &= \psi_{qr}^{\lambda l}(\xi_1, \dots, \xi_{N-1}, \eta_2, \dots, \eta_{N-1}, \zeta_3, \dots, \zeta_{N-1}), \\ \psi_{qr}^{\lambda l}(\xi, \eta, -\zeta) &= (-1)^{l-r} \psi_{qr}^{\lambda l}(\xi, \eta, \zeta). \end{aligned} \quad (10)$$

因为这组基函数 $Q_q^{\lambda l}(R_1, R_2)$ 是关于 Jacobi 坐标分量

的 $(l+\lambda)$ 次齐次多项式, 满足 Laplace 方程 (见 (6) 和 (9) 式), 所以选用 (4) 式给出的内部变量后, 广义径向函数所满足的广义径向方程很容易具体推导出来. 事实上, 把 Laplace 算符作用在 (10) 式的函数 $\Psi_l^{\lambda l}(R_1, \dots, R_{N-1})$ 上, 得

$$\begin{aligned} \sum_{r=0}^l \sum_{q=r}^l Q_q^{\lambda l}(R_1, R_2) \Delta \psi_{qr}^{\lambda l} + 2\{(\partial_{\xi_1} \psi_{qr}^{\lambda l}) 2R_1 + (\partial_{\xi_2} \psi_{qr}^{\lambda l}) R_2 + \sum_{j=3}^{N-1} [(\partial_{\xi_j} \psi_{qr}^{\lambda l}) R_j + (\partial_{\xi_j} \psi_{qr}^{\lambda l}) \cdot (R_2 \wedge R_j)]\} \cdot \nabla_{R_1} Q_q^{\lambda l} + 2\{(\partial_{\xi_2} \psi_{qr}^{\lambda l}) R_1 + (\partial_{\xi_3} \psi_{qr}^{\lambda l}) 2R_2 + \sum_{j=3}^{N-1} [(\partial_{\xi_j} \psi_{qr}^{\lambda l}) R_j + (\partial_{\xi_j} \psi_{qr}^{\lambda l}) \cdot (R, \wedge R_j)]\} \cdot \nabla_{R_2} Q_q^{\lambda l}. \end{aligned} \quad (11)$$

第一项可用变量替换直接计算, 后面项也容易计算. 详细可参看文献 [16, 17]. 对量子三体问题, 有三个内部变量 ξ_1, ξ_2 和 η_2 , 它们都是偶宇称的. 因此角动量本征函数的展开式变成

$$\Psi_l^{\lambda l}(R_1, R_2) = \sum_{q=1}^l \psi_q^{\lambda l}(\xi_1, \xi_2, \eta_2) Q_q^{\lambda l}(R_1, R_2), \quad \lambda = 0, 1. \quad (12)$$

算得广义径向方程为^[11, 18, 19]

$$\begin{aligned} \Delta \psi_q^{\lambda l} + 4q \partial_{\xi_1} \psi_q^{\lambda l} + 4(l-q+\lambda) \partial_{\xi_2} \psi_q^{\lambda l} + 2(q-\lambda) \partial_{\xi_2} \psi_{q-1}^{\lambda l} + 2(l-q) \cdot \partial_{\xi_2} \psi_{q+1}^{\lambda l} &= -\frac{2M}{\hbar^2} (E - V) \psi_q^{\lambda l}, \\ \Delta \psi_q^{\lambda l}(\xi_1, \xi_2, \eta_2) &= \{4\xi_1 \partial_{\xi_1}^2 + 4\eta_2 \partial_{\eta_2}^2 + 6(\partial_{\xi_1} + \partial_{\xi_2}) + (\xi_1 + \eta_2) \cdot \partial_{\xi_1} + 4\xi_2 (\partial_{\xi_1} + \partial_{\xi_2}) \partial_{\xi_2}\} \psi_q^{\lambda l}(\xi_1, \xi_2, \eta_2), \\ \lambda \leq q \leq l, \quad \lambda &= 0, 1. \end{aligned} \quad (13)$$

一旦广义径向方程已经得到, 内部变量可以根据问题需要重新选取. 例如氦原子能级的计算问题是一个典型的量子三体问题, 势函数 V 为

$$V = -\frac{2e^2}{r_{12}} - \frac{2e^2}{r_{13}} + \frac{e^2}{r_{23}}, \quad r_{jk} = |r_j - r_k| \quad (14)$$

其中 r_1 是氦原子核的位置径向量, 而 r_2 和 r_3 分别是电子的位置径向量. 用内部变量 ξ_1, ξ_2 和 η_2 表达时 V 中包含根号, 它在数值计算中出现的级数收敛变慢. 为此引入新的内部变量^[18-20]

$$\begin{aligned} \rho &= (R_1^2 + R_2^2)^{1/2}, \quad \eta = \frac{r_{23}}{\rho}, \\ \zeta &= \frac{r_{12}}{\rho} + \frac{r_{13}}{\rho}, \quad V = -\frac{2\zeta e^2}{\rho \rho} + \frac{e^2}{\rho \eta}, \end{aligned}$$

$$p = \frac{r_{12} r_{13}}{\rho^2} = \frac{\rho^2 \zeta^2 - r_{12}^2 - r_{13}^2}{2\rho^2} \quad (15)$$

把广义径向函数按变量 η 和 ζ 作 Taylor 级数展开, 取到 n 次项, 系数写成列矢量 $R(\rho)$, 它满足关于超半径 ρ 的矩阵常微分方程. 我们对氦原子的不同谱项 $^{2S+1}L^{e(o)}$ 高精度地计算最低能级, 其中 $L=0$ (S 波), 1 (P 波) 和 2 (D 波), 自旋 $S=1$ (正氦)

和 0 (仲氦), 宇称为偶 (e) 和奇 (o), 取 $n=10$ (对 S 波和 P 波) 或 $n=9$ (对 D 波). 计算结果列于表 1. 因为通常的变分计算都假定氦原子核有无穷大质量, 所以为了与变分法的计算结果比较, 也计算了氦核质量等于 10^{20} 倍电子质量的假想氦原子能级, 列于表中. 计算结果表明, 我们的方法级数收敛很快, 计算精度很高.

表 1 氦原子能级计算(取原子单位, M 为氦核与电子质量比)

谱 项 $^{2S+1}L^{e(o)}$	本工作的计算结果		变分计算 [21]
	$M=7\ 296.28$	$M=10^{20}$	$M \sim \infty$
$^1S^e$	2.903 304 6	2.903 724 377 034 116	2.903 724 377 034 119 5
$^3S^e$	2.174 930 3	2.175 229 377 7	2.175 229 378 2
$^1P^e$	0.580 174 8	0.580 246 472 5	0.580 246 5*
$^3P^e$	0.710 500 2	0.710 396 5	0.710 499*
$^1P^o$	2.123 545 6	2.123 843 077 8	2.123 843 086 5
$^3P^o$	2.132 880 7	2.133 164 187	2.133 164 191
$^1D^o$	0.563 725 6	0.563 800 4	
$^3D^o$	0.559 246 2	0.559 328 3	
$^1D^e$	2.055 305 5	2.055 569 3	2.055 620 7
$^3D^e$	2.055 323 0	2.055 587 1	2.055 636 3

* 文献[22]的结果.

总之, 对量子 N 体系统, 我们证明了广义谱和多项式 $Q_l^m(R_1, R_2)$ 构成一组完备的和独立的角动量本征函数基, 系统中任何角动量为 l 和宇称为 $(-1)^{l+1}$ 的波函数都可按这组基展开, 展开系数只依赖于内部变量, 称为广义径向函数. 由于函数基是 Jacobi 坐标分量的齐次多项式, 且满足 Laplace

方程, 使得广义径向方程的推导特别简单. 既然三个转动变量完全分离出去了, 数值计算的工作量将大大减少. 从氦原子能级计算的例子中已经可以清楚地看出这种简化. 我们将进一步用此方法计算更多粒子系统的能级, 例如锂原子的能级.

参 考 文 献:

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

[2] Hirschfelder J O, Wigner E P. Separation of Rotational Coordinates from the Schrödinger Equation for N Particles [J]. Proc Nat Acad Sci, 1935, 21: 113-119.

[3] Pack R T, Hirschfelder J O. Separation of Rotational Coordinates from N -electron Diatomic Schrödinger Equation [J]. J Chem Phys, 1968, 49(9): 4 009-4 020.

[4] Lin C D. Hyperspherical Coordinate Approach to Atomic and Other Coulombic Three-body Systems [J]. Phys Rep, 1995, 257(1): 1-83 and references therein.

[5] Krivec R, Mandelzweig V B. Matrix Elements of Potentials in the Correlation-function Hyperspherical-harmonic Method [J]. Phys Rev A, 1990, 42(7): 3 779-3 788.

[6] Tang J Z, Watanabe S, Matsuzawa M. General Computational Method for Two-electron Systems [J]. Phys Rev A, 1992, 46 (5): 2 437-2 444.

[7] Garai F, Jung C, Menou M, et al. Vector Parametrization of the N -atom Problem in Quantum Mechanics II: Coupled-angular-momentum spectral representations for four-atom systems [J]. J Chem Phys, 1998, 108(21): 8 821-8 829.

[8] Mladenovic M. Rovibrational Hamiltonians for General Polyatomic Molecules in Spherical Polar Parametrization II;

- Nonorthogonal descriptions of internal molecular geometry [J]. *J Chem Phys*, 2000, 112(3): 1 082-1 095.
- [9] lung C, Gatti F, Viel A, *et al.* Vector Parametrization of the N -atom Problem in Quantum Mechanics with Non-orthogonal Coordinates[J]. *Phys Chem Chem Phys*, 1999, 1: 3 377-3 385.
- [10] Eckart C. The Kinetic Energy of Polyatomic Molecules[J]. *Phys Rev*, 1934, 46: 383-387.
- [11] 马中骥. 量子三体问题[J]. *中国科学(A 辑)*, 2000, 30(8): 746-759, *Quantum Three-body Problems*[J]. *Sci China, Ser A (in Chinese)*, 2000, 43(10): 1 093-1 107.
- [12] Ohm Y, Linderberg J. Hyperspherical Coordinates in Four Particle Systems[J]. *Mol Phys*, 1983, 49(1): 53-64.
- [13] Costa L S, Soares Neto J J. A Wave Function Expansion for the Study of Tetra-atomic Molecules in Hyperspherical Coordinate Systems[J]. *Mol Phys*, 1999, 97(6): 725-730.
- [14] Chapuisat X. Principal-axis Hyperspherical Description of N -particle Systems: Quantum-mechanical treatment[J]. *Phys Rev A*, 1992, 45(7): 4 277-4 292.
- [15] Edmonds A R. *Angular Momentum in Quantum Mechanics* [M]. Princeton: Princeton University Press, 1957.
- [16] Gu X Y, Duan B, Ma Z Q. Conservation of Angular Momentum and Separation of Global Rotation in a Quantum N -body System[J]. *Phys Lett A*, 2001, 281: 168-175.
- [17] Gu X Y, Duan B, Ma Z Q. Independent Eigenstates of Angular Momentum in a Quantum N -body System[J]. *Phys Rev A*, 2001, 64(4): 042108.
- [18] Duan B, Gu X Y, Ma Z Q. Precise Calculation for Energy Levels of a Helium Atom in P States[J]. *Phys Lett A*, 2001, 283: 229-236.
- [19] Duan B, Gu X Y, Ma Z Q. Energy Levels in D Waves for a Helium Atom[J]. *Phys Rev A*, 2001, 64(1): 012102.
- [20] Duan B, Gu X Y, Ma Z Q. Energy Levels of a Positronium Negative Ion[J]. *Chinese Phys Lett*, 2001, 18(7): 854-856.
- [21] Drake G W F. *Atomic, Molecular, and Optical Physics Handbook*[M]. New York: American Institute of Physics, 1996, 160.
- [22] Drake G W F, Dalgarno A. $2p^2^3P$ and $2p3p^1P$ States of the Helium Isoelectronic Sequence[J]. *Phys Rev A*, 1970, 1(5): 1 325-1 329.

Generalized Radial Equations for a Quantum N -body System*

MA Zhong-qi, DUAN Bin, GU Xiao-yan

(*Institute of High Energy Physics, the Chinese Academy of Sciences, Beijing 100039, China*)

Abstract: A method without any approximation to separate the global rotational degrees of freedom in the Schrödinger equation for an N -body system completely from the internal ones is presented. For given orbital angular momentum states, we discover a complete set of independent base-functions, which are homogeneous polynomials in the components of the coordinate vectors and satisfy the Laplace equation. Any function with the given angular momentum and the given parity in the system can be expanded with respect to the base-functions, where the coefficients are the functions of the internal variables, called the generalized radial functions. We explicitly establish the simultaneous equations with the finite number for those functions. Only $(3N-6)$ internal variables are involved both in the functions and in the equations.

Key words: quantum N -body system; Schrödinger equation; generalized radial equation

* Foundation Item: NSFC (10075050), the Postdoc Science Foundation