

Green 函数及 δ 函数的三方向球函数展开式*

侯 伯 宇

提 要

将 $\frac{1}{R}$ 及 δ 函数的积分表达式分离径向与角向变量得到了用三个分矢的球函数及幂级数表达的展开式。

在计算分子间的作用力及多原子分子的化学键时,常用到 $\frac{1}{R}$ 的双中心球极坐标展开式(例文献[4—6])。在计算核及基本粒子的相互作用时,如果考虑到其电磁结构,也有可能用到这种展式。Carlson 及 Rushbrook^[1] 首先引进了相离区域 ($r_3 \geq r_1 + r_2$) 内的展式, Buehler 及 Hirschfelder^[2] 进一步找到了在相迭区域 ($r_1 + r_2 \geq r_3 \geq |r_1 - r_2|$) 内的展式,并且造了一个表。唐敖庆及江元生^[3] 曾用递推法得到了与文献[1]相同的结果。文献[2]虽得到了相迭域的式子,但并未将幂级数的同类项归并在一起写出明显的展式,其中因子 $1/(r_{ab} + r_i)^{2n_a - 2i - 1}$ 的幂次比 $V(v)$ 项中 $(r_{ab}^2 - r_i^2)^p$ 的幂次还要高,因此必须证明分母中的 $r_{ab} + r_i$ 可以与其他因子消去,才确能展为幂级数(利用二项式系数的一些性质,经较繁的运算可以证明这一点),文献[2]并未指出这一问题。

我们利用 Green 函数的积分表达式分离了展式的角向部分及径向部分。角向部分的系数用矢量耦合 $3j$ 系数表示,这样既统一了双中心连线即量子化轴时及非量子化轴时的系数,又可以用现成的 $3j$ 系数表代替繁杂的计算或造表,也便于利用 $3j$ 系数的熟知性质简化计算的结果(例如文献[5]中的 (ab, ab, ab) 项及 (ab, bc, ca) 项均可进一步用 Racah 的方法对磁量子数 m 求和,将结果表为 W, X 系数,该文中关于系数 ϕ, θ 的一些等式也就显而易见),展式的转动不变性也较明显。我们用同一个函数在不同域内的幂级数来表示径向部分。统一了文献[2]中四个域内的式子,而且容易看出在各区域边界上展式的连续性及其相互联系。在重迭域得到的明显幂级数式较文献[2]既简明而有对称性,且各项系数间有简单的递推关系。

径向部分的计算要用到三个球 Bessel 函数的乘积的积分。虽然过去已经有过不少作者对此进行了计算(例如文献[7, 8]),但所得结果均限于相离域,由于他们在计算中先处理两个 Bessel 函数,故不易推广到三个函数的变量具有对称性的重迭域。我们用围线积分法与递推法求出了在此区域内展式的对称表达式。所用方法也适于求三个以上的球 Bessel 函数乘积的积分。

本文还作了将 δ 函数依三方向展开的初次尝试。

* 1962年8月13日收到;1963年3月18日收到修改稿。

本节先用围线法再换用递推法计算三个球 Bessel 函数乘积的积分:

$$j_{l_1 l_2 l_3}(r_1 r_2 r_3) \equiv \int_0^\infty j_{l_1}(Kr_1) j_{l_2}(Kr_2) j_{l_3}(Kr_3) K^\lambda dK,$$

式中 l, λ 为整数, 且 $l_1 + l_2 + l_3 + \lambda \geq 0, \lambda \leq 2$ (这就保证了积分的收敛性); $j_l(Kr) = \sqrt{\frac{\pi}{2Kr}} J_{l+\frac{1}{2}}(Kr)$ 为 l 阶球 Bessel 函数¹⁾, r 取非负值, l 取负值时 $j_l = (-1)^{l-n-l-1}$ 为球 Neumann 函数(以后省略 $j_{li}(Kr_i)$ 的变量 Kr_i).

在 $l_1 + l_2 + l_3 + \lambda$ 为偶数时, 利用 j_l 的字称为 $(-1)^l$ 可得 $j_{l_1 l_2 l_3} = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^\infty j_{l_1} j_{l_2} j_{l_3} K^\lambda dK$, 由于 j_l 的渐近展式中既有含因子 e^{iz} 的项, 也有含 e^{-iz} 的项, 不能用在无穷远处的上半圆或下半圆构成围线. 故用在上半圆趋于零的第一类球 Hankel 函数 h_l 代替 j_l . 在 $S_1 \leq 0$ ($S_1 \equiv S - r_1 \equiv \frac{r_1 + r_2 + r_3}{2} - r_1 = \frac{1}{2}(r_2 + r_3 - r_1)$) 的区域内可以化上式如下:

$$\begin{aligned} j_{l_1 l_2 l_3} &= \frac{1}{2} \int_{c_1} j_{l_1} j_{l_2} j_{l_3} K^\lambda dK = \frac{1}{2} \int_{c_1} (h_{l_1} - i n_{l_1}) j_{l_2} j_{l_3} K^\lambda dK = \\ &= \frac{1}{2} \int_{c_2} h_{l_1} j_{l_2} j_{l_3} K^\lambda dK - \frac{i}{2} \int_{c_3} n_{l_1} j_{l_2} j_{l_3} K^\lambda dK, \end{aligned}$$

式中积分路线 c_1 包括: 负半轴 $(-\rho, -\epsilon)$, 绕原点的上半小圆 $\epsilon e^{i\varphi}$ (φ 由 π 至 0), 正半轴 $(+\epsilon, +\rho)$ ($\rho \rightarrow \infty, \epsilon \rightarrow 0$); c_2 则包括: 负半轴、上半小圆、正半轴及上半面的大半圆 $\rho e^{i\varphi}$ (φ 由 0 至 π); c_3 为绕原点的上半小圆 $\epsilon e^{i\varphi}$ (φ 由 π 至 0). 第一个等号是利用被积函数在原点附近一致趋于零而得到的. 最后一个等号则考虑了前一个积分在上半大半圆上的值为零; 而 $\int_\epsilon^\rho + \int_{-\rho}^{-\epsilon} n_{l_1} j_{l_2} j_{l_3} K^\lambda dK = \int_\epsilon^\rho - \int_\epsilon^\rho n_{l_1} j_{l_2} j_{l_3} K^\lambda dK = 0$ ($\because n_{l_1}$ 的字称与 j_{l_1} 相反).

c_2 内无极点, 沿它的积分为零, 沿 c_3 的积分为在原点留数的 $-i\pi$ 倍. 将球 Bessel 函数的幂级数展式代入求 K^{-1} 项的系数, 并经简单变化, 得

$$j_{l_1 l_2 l_3}(r_1 r_2 r_3) = (-1)^{\frac{l_1 + l_2 + l_3 + \lambda}{2}} \pi 2^{\lambda-3} \sum_{L_i} \prod_{i=1,2,3} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) r_i^{L_i}}{\Gamma\left(\frac{L_i + l_i + 1}{2} + 1\right) \Gamma\left(\frac{L_i - l_i}{2} + 1\right)}. \quad (1)$$

式中的幂指数 L_i 需满足条件 $L_1 + L_2 + L_3 = -\lambda - 1$, 且 $L_i - l_i$ 中仅 $L_1 - l_1$ 为奇数. 与分母中 Γ 函数的极点对应的项为零, 故实际上只有有限项.

在 $S_2 \leq 0$ 及 $S_3 \leq 0$ 区域内的结果相似, 只是 $L_i - l_i$ 的奇偶应作相应的改变.

1) 本文中各种球 Bessel 函数的定义请参看文献[9].

在 $S_1 S_2 S_3 \geq 0$ 的区域内则有

$$\begin{aligned} \lambda j_{l_1, l_2, l_3} &= \frac{1}{4} \int_{c_2} (h_{l_1} h_{l_2} j_{l_3} + j_{l_1} h_{l_2} h_{l_3} + h_{l_1} j_{l_2} h_{l_3} - h_{l_1} h_{l_2} h_{l_3}) K^\lambda dK - \\ &\quad - \frac{i}{4} \int_{c_3} (n_{l_1} j_{l_2} j_{l_3} + j_{l_1} n_{l_2} j_{l_3} + j_{l_1} j_{l_2} n_{l_3} + n_{l_1} n_{l_2} n_{l_3}) K^\lambda dK = \\ &= (-)^{\frac{l_1+l_2+l_3+\lambda}{2}} \pi 2^{\lambda-4} \sum_{L_i} \alpha(L_i, l_i) \prod_{i=1,2,3} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) r_i^{L_i}}{\Gamma\left(\frac{L_i+l_i+1}{2}+1\right) \Gamma\left(\frac{L_i-l_i}{2}+1\right)}, \quad (2) \end{aligned}$$

式中 $L_1 + L_2 + L_3 = -\lambda - 1$, $\alpha(L_i, l_i) = \begin{cases} -1 & \text{当 } L_i - l_i \text{ 均为奇数} \\ 1 & \text{当 } L_i - l_i \text{ 之一为奇数.} \end{cases}$

易見其項数也是有限的.

也可以用递推法来求 $\lambda j_{l_1, l_2, l_3}$ 的幂级数展式(2). 为此, 設

$$\lambda j_{l_1, l_2, l_3} = \sum_{L_i} \Gamma_{l_1, l_2, l_3}^{L_1, L_2, L_3} r_1^{L_1} r_2^{L_2} r_3^{L_3}. \quad (2')$$

式中 $\Gamma_{l_1, l_2, l_3}^{L_1, L_2, L_3}$ 为待定的系数. 在积分号下求 $\lambda j_{l_1, l_2, l_3}$ 对参变量 r_i 的微商, 可得等式

$$\frac{1}{r_i^2} \left[\frac{d}{dr_i} r_i^2 \frac{d}{dr_i} - l_i(l_i + 1) \right] \lambda j_{l_1, l_2, l_3} = \frac{1}{r_j^2} \left[\frac{d}{dr_j} r_j^2 \frac{d}{dr_j} - l_j(l_j + 1) \right] \lambda j_{l_1, l_2, l_3}.$$

将(2')代入上式, 就可求得递推关系

$$(L_1 + l_1 + 1)(L_1 - l_1) \Gamma_{l_1, l_2, l_3}^{L_1, L_2-2, L_3} = (L_2 + l_2 + 1)(L_2 - l_2) \Gamma_{l_1, l_2, l_3}^{L_1-2, L_2, L_3}. \quad (3a)$$

由之可得 $\lambda j_{l_1, l_2, l_3}$ 展式中 L_i 奇偶性相同之各項間的关系, 从而可見展式必取(2)式連乘符号后的形式.

此外, 再根据

$$\left(\frac{d}{dr_1} + \frac{l_1 + 2}{r_1} \right) \lambda j_{l_1+1, l_2, l_3} = {}_{\lambda+1} j_{l_1, l_2, l_3} = - \left(\frac{d}{dr_1} - \frac{l_1 - 1}{r_1} \right) \lambda j_{l_1-1, l_2, l_3}$$

可得递推关系

$$(L_1 + l_1 + 2) \Gamma_{l_1+1, l_2, l_3}^{L_1, L_2, L_3} = \Gamma_{l_1, l_2, l_3}^{L_1-1, L_2, L_3} = - (L_1 - l_1 + 1) \Gamma_{l_1-1, l_2, l_3}^{L_1, L_2, L_3}. \quad (3b)$$

由此式及类似的式子可得 $l_1 + l_2 + l_3 + \lambda$ 同为偶数(或同为奇数)的各个函数 $\lambda j_{l_1, l_2, l_3}$ 間的递推关系, 从而易見 $\lambda j_{l_1, l_2, l_3}$ 的展式形式如(2), 只要在偶(或奇) $\lambda j_{l_1, l_2, l_3}$ 中各利用一个已知的非零收敛积分求出 $\alpha(L, l)$ 就可以了.

例: 当 $l_1 + l_2 + l_3 + \lambda =$ 偶数时, 利用

$$o j_{0,0,0} \equiv \int_0^\infty j_0 j_0 j_0 dK = \begin{cases} \frac{\pi}{2} \frac{1}{r_i} & \text{在 } S_i \leq 0 \text{ 域,} \\ \frac{\pi}{2} \frac{1}{r_1 r_2 r_3} \sum_{ij} S_i S_j \quad i < j & \text{在 } S_1 S_2 S_3 \geq 0 \text{ 域,} \end{cases} \quad (4)$$

代入(2), 求得 $\alpha(L, l_i)$ 結果同前.

当 $l_1 + l_2 + l_3 + \lambda = \text{奇数}$ 时, 利用

$$2j_{-1,0,0} \equiv - \int_0^\infty n_0 j_0 j_0 K^2 dK = \frac{1}{4} \frac{1}{r_1 r_2 r_3} \ln \frac{|S| |S_1|}{|S_2| |S_3|},$$

易得在 $S_1 < 0$ 域内

$$2j_{-1,0,0} = \sum_{L_i} \frac{-\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) \Gamma\left(\frac{-1-L_1}{2}\right) \Gamma\left(\frac{-L_1}{2}\right)}{2\Gamma\left(\frac{L_2+1}{2}+1\right) \Gamma\left(\frac{L_2}{2}+1\right) \Gamma\left(\frac{L_3+1}{2}+1\right) \Gamma\left(\frac{L_3}{2}+1\right)}.$$

式中 $L_1 + L_2 + L_3 = -3$; $-1-L_1-2$ 及 L_2, L_3 为非负偶数.

在 $S_2 < 0$ 域内,

$$2j_{-1,0,0} = \sum_{L_i} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) \Gamma\left(\frac{-1-L_2}{2}\right) \Gamma\left(-\frac{L_2}{2}\right) r_1^{L_1} r_2^{L_2} r_3^{L_3}}{2\Gamma\left(\frac{L_3+1}{2}+1\right) \Gamma\left(\frac{L_3}{2}+1\right) \Gamma\left(\frac{L_1}{2}+1\right) \Gamma\left(\frac{L_1+1}{2}+1\right)}.$$

式中 $L_1 + L_2 + L_3 = -3$; $L_1-1, -L_2-2$ 及 L_3 为非负偶数.

$S_3 < 0$ 域内的展式相仿. 故可得在 $l_1 + l_2 + l_3 + \lambda$ 为奇数时, 在 $S_i < 0$ 的区域內 $\alpha(L, l) = (-)^{3/2} 2 \csc \frac{L_i - l_i}{2} \pi \csc \frac{L_i + l_i + 1}{2} \pi$, 当 $l_i - L_i - 2$ 及其余的 $L_i - l_i (j \neq i)$ 为非负偶数, 而且 $L_1 + L_2 + L_3 = -\lambda - 1$; L 不符合上述条件各项前的 $\alpha(Ll) = 0$. 这里的余割函数是形式上引进的, 表示应当移相应的 Γ 函数到分子上. 易见, 这时展式有无穷个项.

在 $S_1 S_2 S_3 > 0$ 域内可化 $2j_{-1,0,0}$ 为 $\sum_n \frac{1}{2(2n+1)} \left[\frac{r_2^2 + r_3^2 - r_1^2}{2r_2 r_3} \right]^{2n+1} \frac{1}{r_1 r_2 r_3}$, 这是一个条件收敛级数. 将 r_i 的同次项归并后形式上可写成

$$\sum_{L_i} (-) \frac{1}{4\sqrt{\pi}^7} \prod_i \Gamma\left(-\frac{L_i+1}{2}+1\right) \Gamma\left(-\frac{L_i}{2}+1\right) r_i^{L_i},$$

$$L_1 + L_2 + L_3 = -3,$$

L_2, L_3 为偶数, 但实质上是发散的. 故 $l_1 + l_2 + l_3 + \lambda$ 为奇数的 $2j_{l_1, l_2, l_3}$ 在交迭域不能展为单幂级数展式.

二

本节求 $\frac{1}{R}$ ($\mathbf{R} = \mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2 + \mathbf{r}_3$) 的球函数展开式.

$\frac{1}{R}$ 作为 Laplace 算子的 Green 函数可用其本征函数——平面波 $e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}}$ 展开:

$$\frac{1}{R} = \frac{1}{2\pi^2} \int \frac{e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}}}{K^2} d^3K = \frac{1}{2\pi^2} \int \frac{e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}_1} e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}_2} e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}_3}}{K^2} d^3K.$$

将各分矢的平面波用熟知的展式分解为球面波(为了以下运算的方便, 用广义球函数代替常用的 Legendre 函数)就得到

$$\frac{1}{R} = \frac{1}{2\pi^2} \sum_{l_i} (-1)^{\frac{l_1+l_2+l_3}{2}} (2l_1+1)(2l_2+1)(2l_3+1) \times \\ \times \int D_{0,0}^{l_1}(\Omega^{-1}\omega_1) D_{0,0}^{l_2}(\Omega^{-1}\omega_2) D_{0,0}^{l_3}(\Omega^{-1}\omega_3) j_{l_1}(Kr_1) j_{l_2}(Kr_2) j_{l_3}(Kr_3) \frac{d^3K}{K^2},$$

式中 $D_{0,0}^{l_i}$ 为广义球函数¹⁾, ω_i 为将固定坐标系的极轴变到矢径 r_i 方向的转动, Ω 则为将极轴变到 K 的转动. $\Omega^{-1}\omega_i$ 的章动角就是 K 、 r_i 的夹角 θ_i , 故 $D_{0,0}^{l_i}(\Omega^{-1}\omega_i)$ 即 Legendre 函数 $P^l(\cos\theta_i)$. 将 $D_{0,0}^{l_i}(\Omega^{-1}\omega) = \sum_m D_{0,m}^{l_i}(\Omega^{-1}) D_{m,0}^{l_i}(\omega)$ 代入上式, 并将三个 $D_{0,m}^{l_i}$ 的乘积在羣上的积分表为 $3j$ 系数(例如参看文献[10]), 就可算得角向积分, 径向积分见上节.

$$\frac{1}{R} = \frac{2}{\pi} \sum_{l_i, m_i} (-1)^{\frac{l_1+l_2+l_3}{2}} (2l_1+1)(2l_2+1)(2l_3+1) \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \times \\ \times D_{m_1,0}^{l_1}(\varphi_1\theta_1 0) D_{m_2,0}^{l_2}(\varphi_2\theta_2 0) D_{m_3,0}^{l_3}(\varphi_3\theta_3 0) j_{l_1, l_2, l_3}(r_1 r_2 r_3). \quad (5)$$

式中 $\begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}$ 为对称化的 $3j$ 系数, θ_i , φ_i 为 r_i 的方向角. 由 $3j$ 系数的性质易见, (5) 式各项的 l 满足动量矩选择律 ($l_2 + l_3 \geq l_1 \geq |l_2 - l_3|$) 及宇称选择律 ($l_1 + l_2 + l_3$ 为偶数). 故由(1)式可知, 在 $S_1 \leq 0$ 域内只有 $l_2 + l_3 = l_1$ 的项非零. 这时展式可简化为

$$\frac{1}{R} = \sum_{l_i, m_i} \delta_{l_1, l_2+l_3} \sqrt{\frac{(2l_1+1)!}{(2l_2)!(2l_3)!}} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} D_{m_1,0}^{l_1}(\varphi_1\theta_1 0) D_{m_2,0}^{l_2}(\varphi_2\theta_2 0) D_{m_3,0}^{l_3}(\varphi_3\theta_3 0) \frac{r_2^{l_2} r_3^{l_3}}{r_1^{l_1+1}}. \quad (6)$$

沿 r_1 的方向取极轴, 则有

$$\frac{1}{R} = \sum_{l_i, m} \delta_{l_1, l_2+l_3} \sqrt{\frac{(2l_1+1)!}{(2l_2)!(2l_3)!}} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ 0 & m & -m \end{pmatrix} D_{m,0}^{l_2}(\varphi_2\theta_2 0) D_{-m,0}^{l_3}(\varphi_3\theta_3 0) \frac{r_2^{l_2} r_3^{l_3}}{r_1^{l_1+1}}. \quad (7)$$

即通常^[1-3]的双中心球坐标展式, 不过为了使得在各相离域展式的形式完全相仿, 同时为了使得重迭域内的展式更有对称性, 我们采用了 $\mathbf{R} = \mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2 + \mathbf{r}_3$, 而通常用的是 $\mathbf{R} = \mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3$. 故我们的 φ_3, θ_3 相当于通常的 $\pi + \varphi_3$ 及 $\pi - \theta_3$, 而展式与常用展式有相位的差别.

为了与文献[2]在重迭域内的结果比较, 在(5)式中取极轴沿 $\mathbf{r}_1$ 方向, 有

$$\frac{1}{R} = \sum_{l_i, m} (-1)^{\frac{l_1+l_2+l_3}{2}} \frac{2}{\pi} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ 0 & m & -m \end{pmatrix} D_{m,0}^{l_2}(\varphi_2\theta_2 0) D_{-m,0}^{l_3}(\varphi_3\theta_3 0) j_{l_1, l_2, l_3}(r_1 r_2 r_3).$$

在计算幂级数各项的系数时, 请注意下列事项:

1. 只有 l_1, l_2, l_3 的和为偶数且遵守动量矩选择律的项.
2. 仅当 $l_1 = l_2 + l_3$ 时, 才有 $L_1 - l_1$ 为奇数, 而 $L_2 - l_2, L_3 - l_3$ 为偶数的项. 且只有一项, 即 $L_1 = -l_1 - 1, L_2 = l_2, L_3 = l_3$ 的项, 其系数为(7)式相应系数的 $\frac{1}{2}$. 仅 $L_2 - l_2$ 或 $L_3 - l_3$ 为奇的项的出现规律与之相同.
3. $L_i - l_i$ 均为奇数的项可由(3a)式从 $L_1 = -l_1 - 1, L_2 = -l_2 - 1, L_3 = l_1 +$

1) 本文中的函数 $D_{m, m}^{l_i}$, P^l 及 $3j$ 系数的定义及位相请参看文献[10].

+ $l_2 + 1$ 的項出发递推到 $L_1 = -l_1 - 1$, $L_2 = l_3 + l_1 + 1$, $L_3 = -l_3 + 1$ 的項, 或 $L_1 = l_2 + l_3 + 1$, $L_2 = -l_2 - 1$, $L_3 = -l_3 - 1$ 的項而逐个求得.

4. 还可以用递推关系 (3b) 式及类似的式子从 l 較小的項求 l 較大的項.

5. 当对于同一組 l_2, l_3 的值有若干个符合条件(1)的 l_1 值 ($l_2 + l_3, l_2 + l_3 - 2, l_2 + l_3 - 4, \dots, |l_2 - l_3|$) 时, 需对这些 l_1 求和才是文献[2]的結果.

例如: 注意到 $(2l_1 + 1)(2l_2 + 1)(2l_3 + 1) \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ 0 & m & -m \end{pmatrix}$ 当 $l_2 = l_3 = 0$ 时取值 $\delta_{l_1, 0} \delta_{m, 0}$, 而当 $l_2 = 1, l_3 = 0$ 时取值 $3\delta_{l_1, 1} \delta_{m, 0}$; 再利用

$$\begin{aligned} j_{0, 0, 0} &= \frac{\pi}{2} \cdot \frac{1}{4} \left(-\frac{r_3}{r_1 r_2} - \frac{r_1}{r_2 r_3} - \frac{r_2}{r_3 r_1} + \frac{2}{r_1} + \frac{2}{r_2} + \frac{2}{r_3} \right) \quad [\text{參看 4 (式)}], \\ j_{1, 1, 0} &= \frac{\pi}{2} \cdot \frac{1}{48} \left(-\frac{8r_1}{r_2^2} - \frac{8r_2}{r_1^2} - \frac{r_3^3}{r_1^2 r_2^2} + \frac{6r_3}{r_1^2} + \frac{6r_3}{r_2^2} + \frac{3r_2^2}{r_1^2 r_3} + \frac{3r_1^2}{r_2^2 r_3} - \frac{6}{r_3} \right) \end{aligned}$$

[由(2)式直接求得, 或利用法則(2), (3), (4)], 即得文献[2]的表中第一及第二列.

由(4)式易証, 在相离域与重迭域的边界 $S_i = 0$ 处, $j_{0, 0, 0}$ 的二展式相等. 故由 $j_{0, 0, 0}$ 递推出其余 j_{l_1, l_2, l_3} 的过程可看出 $\frac{1}{R}$ 展式各項的径向部分 j_{l_1, l_2, l_3} 都是連續的.

三

本节将 δ 函数依三方向球函数展开:

$$\begin{aligned} \delta(\mathbf{R}) &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}} d^3K = \\ &= \frac{1}{2\pi^2} \sum_{l_i m_i} (-1)^{\frac{l_1 + l_2 + l_3}{2}} (2l_1 + 1)(2l_2 + 1)(2l_3 + 1) \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ m_1 m_2 m_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \times \\ &\quad \times D_{m_1, 0}^{l_1} D_{m_2, 0}^{l_2} D_{m_3, 0}^{l_3} j_{l_1, l_2, l_3}. \end{aligned} \quad (8)$$

由(1)式易見, 此展式各項在 $S_i \leq 0$ 的域內为零.

利用 δ 函数的特性 $\int f(\mathbf{r}_1) \delta(\mathbf{R}) d^3r_1 = f(-\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3) \equiv f(\mathbf{r}_{23})$, 可由(8)得到一些有用的式子, 例如

$$\begin{aligned} r_{23}^{l_1} D_{m_1, 0}^{l_1}(\varphi_{23}, \theta_{23}, 0) &= \sum_{\substack{l_2 m_2 \\ l_3 m_3}} \delta_{l_1, l_2 + l_3} \sqrt{\frac{(2l_1 + 1)!}{(2l_2)!(2l_3)!}} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ m_1 m_2 m_3 \end{pmatrix} \times \\ &\quad \times D_{m_2, 0}^{l_2}(\varphi_2, \theta_2, 0) D_{m_3, 0}^{l_3}(\varphi_3, \theta_3, 0) r_2^{l_2} r_3^{l_3}. \end{aligned} \quad (9)$$

$$\begin{aligned} r_{23}^{-l_1-1} D_{m_1, 0}^{l_1}(\varphi_{23}, \theta_{23}, 0) &= \sum_{\substack{l_2 m_2 \\ l_3 m_3}} \delta_{l_1, l_2 - l_3} \sqrt{\frac{(2l_2 + 1)!}{(2l_1)!(2l_3)!}} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ m_1 m_2 m_3 \end{pmatrix} \times \\ &\quad \times D_{m_2, 0}^{l_2}(\varphi_2, \theta_2, 0) D_{m_3, 0}^{l_3}(\varphi_3, \theta_3, 0) \frac{r_2^{l_2} r_3^{l_3}}{r_{>}^{l_2+1} r_{<}^{l_3+1}}. \end{aligned} \quad (10)$$

式中 $r_>, r_<$ 表示 r_2, r_3 中較大較小者; $l_>, l_<$ 是与之对应的 l . 求上二式时利用了积分

号下对参变量积分而得的

$$\int_{|r_2-r_3|}^{r_2+r_3} 2j_{l_1, l_2, l_3} r_1^{l_1+2} dr_1 = r_1^{l_1+2} j_{l_1+1, l_2, l_3} \Big|_{r_1=|r_2-r_3|}^{r_1=r_2+r_3}$$

及

$$\int j_{l_1, l_2, l_3} r_1^{1-l_1} dr_1 = -r_1^{1-l_1} j_{l_1-2, l_2, l_3}$$

二式.

(2), (3) 二式即球体函数的 Hobson 公式的推广, 也可以由 (6) 式与 $\frac{1}{R}$ 的寻常二方向 Neumann 展式比较而得 (9), (10) 式.

結 束 語

过去, δ 函数的展式 (正交函数系的封闭性公式) 及 Green 函数的 Mercer 展式都是由正交函数两两乘积的和构成的. 我们作了用三重积来展开的尝试.

Gordan 方程的 Green 函数 $\frac{e^{-K_0 R}}{R} = \frac{1}{2\pi^2} \int \frac{e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}}}{K^2 + K_0^2} d^3K$ 也可用第二节的方法分离变量, 再用围线法求径向积分, 从而得到其三方向展式.

利用 $e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}_i}$ 的 Jacobin 函数展式或 Gegenbauer 函数展式, 还可以得到 Green 函数及 δ 函数在球极坐标系中的其他三方向展式. 仿此可得 Laplace 算子的其余可分离变量的本征函数的展式.

用本文的方法也可以得到通常的两方向 Neumann 展式, 而且还适用于求更多方向的展式. 比较这些展式可以得到更高次的球体函数 Hobson 展式, 以及 Laplace 算子的各种本征函数用本征函数的积展开的式子.

文振翼同志借到了唐敖庆等同志的论文介绍给我学习, 并帮我核对一些结果, 特此志謝.

参 考 文 献

- [1] Carlson Rushbrook, *Proc. Cambridge Phil. Soc.*, 46 (1950), 626.
- [2] Buehler Hirschfelder, *Phys. Rev.*, 83 (1951), 628; 85 (1952), 149.
Hirschfelder & others, *Molecular theory of gases and liquids* (1954).
- [3] 唐敖庆、江元生, 东北人民大学自然科学学报, 1 (1955), 208.
- [4] 孙家鍾、蔣栋成、周木易, 物理学报, 18 (1962), 117.
- [5] 唐敖庆、孙家鍾, *Science Record*, 1 (1957), 219; 2 (1958), 154.
- [6] 孙家鍾、蔣栋成, 物理学报, 17 (1961), 559.
- [7] Watson, *Jour. London Math. Soc.*, 9 (1934), 16.
- [8] Bailey, *Proc. London. Math. Soc.*, (2) 40 (1935), 37.
Jour. London Math. Soc., 11 (1936), 16.
- [9] Morse & Feshbach, *Methods of Theoretical Physics*.
- [10] Edmonds, *Angular Momentum in Quantum Mechanics*.

THREE DIRECTIONAL EXPANSION OF GREEN FUNCTIONS & δ FUNCTION

HOU PEI-YU

ABSTRACT

By using the integral representation of Green function and δ function, it is very easy to separate the angular and radial variables and obtain an explicit expansion.