

计算酉群生成元乘积矩阵元的一个新途径

文 振 翼

(西安矿业学院)

1982年8月20日收到

提 要

本文给出一个简单方法,可以确定酉群生成元算子作用于任何 Gelfand 态时产生的全部 Gelfand 态,若与计算矩阵元的片断值方法相结合,本文的方法将是计算酉群生成元乘积矩阵元一个可能途径。

近几年来,将多电子体系的波函数以酉群的正则基——Gelfand 基展开的酉群方法 (UGA) 显得异常活跃,这一方法已成功地处理了多电子体系的组态相互作用和其它电子结构问题^[1-3],并且正和电子传播函数理论^[4],耦合集团理论 (CCA)^[5] 以及多体微扰理论 (MBPT) 联系起来。在这类联系中遇到的一个关键问题是如何计算任意个生成元乘积的矩阵元。如所周知,矩阵元的原始计算公式,即使对于单个素升算子和素降算子也是非常复杂的。Paldus^[6] 针对原子和分子问题中轨道的占据数不能超过 2 这一特点,简化了 Gelfand 态的符号,并由此导出了极为简单的计算单个生成元算子矩阵元的公式。然而对于生成元乘积矩阵元的计算,遇到了必须对数目很大的中间态求和的麻烦。最近几年,关于计算方法改进的主要成就之一就是避免了对中间态的求和,证明了单生成元或两个生成元算子的乘积的矩阵元可以写成轨道级片断值的乘积,并且找到了计算所需的全部片断值^[7-9]。但是,这一方法似乎难以推广应用于三个及三个以上生成元乘积矩阵元的计算。因此,正如 Shavitt 指出^[4],关于三个及三个以上乘积的矩阵元,目前仍然没有找到有效的计算方法。

另一方面,重新考查对中间态的求和,我们发现,中间态的数目虽然很大,但是大量的中间态对矩阵元并没有贡献。因此,如果有一个简便方法能够挑选出那些有贡献的中间态,再与上述的片断值方法结合起来,将为多个生成元算子乘积矩阵元的计算找到一个简化途径。这就是本文试图解决的问题。

设有 n 个已被编序的等价的正交归一的轨道,它们之间的线性变换的全体形成了 $U(n)$ 群,按通常的方法可以定义该群的无穷小算子(生成元)。Gelfand 态(基)就是这些无穷小算子表示的正则基,或按子群链

$$U(n) \supset U(n-1) \supset \cdots \supset U(1)$$

约化的分类基. 根据 Paldus^[6], 为了处理原子和分子问题, 可将 Gelfand 态记为

$$[a, b, c_r] \quad r = 1, 2, \dots, n, \\ a_r + b_r + c_r = r. \quad (1)$$

a_r, b_r 和 c_r 依 $r = 1, 2, \dots, n$ 自下而上排列成一个表 (Paldus 盘). 表的每一行确定了 $U(r)$ 的一个不可约表示 $[2^{a_r} 1^{b_r} 0^{c_r}]$; 顶端的 $a_n \equiv a = N/2 - S$, $b_n \equiv b = 2S$ (N 为电子总数, S 为总自旋量子数) 和 $c_n \equiv c = n - a - b$ 确定了 $U(n)$ 的一个不可约表示. 因为 a_r, b_r 和 c_r 三个量中只有两个是独立的, 故又可用 $[a, b_r]$ 标记 Gelfand 态. 然而, 一个更简单的标记是一个整矢量——步矢量 (step vector) $\mathbf{d}$, 定义为

$$\mathbf{d} = |(d_r)\rangle \quad r = 1, 2, \dots, n,$$

式中

$$d_r = 3\Delta a_r + \Delta b_r, \quad (2)$$

而

$$\Delta a_r = a_r - a_{r-1}, \quad \Delta b_r = b_r - b_{r-1}, \quad a_0 = b_0 = 0. \quad (3)$$

d_r 叫做步数 (step number). 既然步矢量可作为 Gelfand 态的标记, a_r, b_r 和 n_r (第 r 个轨道的占据数) 当可由它表达. 于是, 有

$$a_r = \frac{1}{3} \sum_{i=1}^r [d_i - \delta(d_i, 1) + \delta(d_i, 2)], \quad (4)$$

$$b_r = \sum_{i=1}^r [\delta(d_i, 1) - \delta(d_i, 2)], \quad (5)$$

$$n_r = \frac{1}{3} [2d_r + \delta(d_r, 1) - \delta(d_r, 2)], \quad (6)$$

式中 $\delta(d_i, 1)$ 等为 Kronecker δ 符号. d_r 只能取四个值: 0, 1, 2 和 3, 分别对应着 $n_r = 0, 1(\Delta S = 1/2), 1(\Delta S = -1/2)$ 和 2. 步矢量很容易转换成标记 Gelfand 态的另一符号——Weyl 盘. 对于 $d_r = 1$ 或 2, 轨道态 r 出现在 Weyl 盘的第一列或第二列; 对于 $d_r = 0$ 或 2, 轨道指标 r 在 Weyl 盘不出现或两列各出现一次. 从这一对应关系和 (5) 式, 可以看出, 正确的 Weyl 盘必须满足的条件之一是同一行的轨道指标不能降低对应着一个十分明显的条件

$$b_r \geq 0 \quad r = 1, 2, \dots, n. \quad (7)$$

由 (5) 式还可以看到, 在 Weyl 盘的第一列取出 (放入) 第 r 个轨道指标, 则 $b_i (i \geq r)$ 将减少 1 (增加 1); 从第二列取出 (放入) 第 r 个轨道指标, $b_i (i \geq r)$ 将增加 1 (减少 1). 因此, 若交换第一列的轨道指标 k 与第二列的轨道指标 l , 则得到的新的 Gelfand 态中的 b' 值成为

$$k < l: \begin{cases} b'_r = b_r - 2, & r = k, k+1, \dots, (l-1), \\ b'_r = b_r, & r < k \text{ 或 } r \geq l. \end{cases} \quad (8)$$

或

$$k > l: \begin{cases} b'_r = b_r + 2, & r = l, l+1, \dots, (k-1), \\ b'_r = b_r, & r < l \text{ 或 } r \geq k. \end{cases} \quad (9)$$

这里 b_r 是交换前的值.

现在讨论生成元算子的矩阵元. 依照 Paldus 和 Boyle^[9], 生成元算子的矩阵元可以写成片断值 W 的乘积,

$$\langle (\tilde{d}_r) | E_{ij} | (d_r) \rangle = \prod_{r \in Q} W(Q_r; \tilde{d}_r, \Delta b_r, b_r), \quad (10)$$

式中

$$Q = \begin{cases} \{j, j+1, \dots, i\} & j < i, \\ \{i, i+1, \dots, j\} & j > i. \end{cases}$$

$\Delta b_r = b_r - \tilde{b}_r$. Q_r 确定片断值的类型. 为了找到所需要的片断值 $W(Q_r; \tilde{d}_r, \Delta b_r, b_r)$, Paldus 和 Boyle 将 Gelfand 态变换成等价的 Yamanouchi-Kotani 态, 并利用了自旋代数的图形方法和角动量重耦合技巧; 而 Shavitt^[8] 则利用了生成元算子的递推关系. 然而, 这些片断值可以更容易地从生成元算子矩阵元的已知公式^[10]直接得到. 由文献 [10] 第四节的有关公式, 可以证明, 对降算子

$$W(A^L; \tilde{d}_r, \Delta b_r, b_r) = \frac{f(i_r, 1)}{f(i_{r-1}, \tau)} = \frac{f(i_r, 1)}{f(i_{r-1}, 1)}, \quad (11)$$

$$W(A_L; \tilde{d}_r, \Delta b_r, b_r) = \frac{f(i_{r-1}, 0)}{f(i_r, 1-\tau)} = \frac{f(i_{r-1}, 0)}{f(i_r, 1)}, \quad (12)$$

$$W(C; \tilde{d}_r, \Delta b_r, b_r) = (-1)^\tau \frac{f(i_r, 1)}{f(i_{r-1}, \tau)} \cdot \frac{f(i_{r-1}, 0)}{f(i_r, 1-\tau)} \cdot g(i_r, i_{r-1}; \tau). \quad (13)$$

这里

$$f(i_r, 0) = \begin{cases} \sqrt{b_r + 2}, & i_r = a_r, \\ \sqrt{b_r}, & i_r = a_r + b_r; \end{cases} \quad (14)$$

$$f(i_r, 1) = \sqrt{b_r + 1}; \quad (15)$$

$$g(i_r, i_{r-1}; \tau) = \begin{cases} (\lambda_{i_r, r} - \lambda_{i_{r-1}, r-1} + i_{r-1} - i_r + 1)^{-1} & \tau = 0, \\ -(\lambda_{i_r, r} - \lambda_{i_{r-1}, r-1} + i_{r-1} - i_r)^{-1} & \tau = 1. \end{cases} \quad (16)$$

$\lambda_{i_r, r}$ 为 Gelfand 盘中的指标. i_r 和 i_{r-1} 分别为在第 r 行和第 $r-1$ 行执行降运算的位置 (完成降运算后, $\lambda_{i_r, r}$ 将代之以 $\lambda_{i_r, r}-1$ 等). τ 为一个表示在 r 行或 $r-1$ 行执行降运算次序的因子. 如果执行次序是 $r-1$ 行在先, r 行在后, 则取 $\tau = 0$, 反之, 取 $\tau = 1$. 当执行次序不受限制时, 总是取 $\tau = 1$. 作为一个例子, 我们计算降算子矩阵元的底端片断值. 由 (12) 和 (15) 式, 有

$$W(A^L; \tilde{d}_r, \Delta b_r, b_r) = \left(\frac{b_r + 1}{b_{r-1} + 1} \right)^{\frac{1}{2}},$$

于是得到

$$W(A^L; 01, 1, b_r) = \left(\frac{b_r + 1}{b_r} \right)^{\frac{1}{2}},$$

$$W(A^L; 02, -1, b_r) = \left(\frac{b_r + 1}{b_r + 2} \right)^{\frac{1}{2}},$$

$$W(A^L; 13, -1, b_r) = W(A^L; 23, 1, b_r) = 1.$$

其它的 $W(A^L)$ 均为零, 与 Paldus 和 Boyle 的结果 (及其相约定 IIB) 一致. 对升算子我们可做类似推演, 或直接利用生成元算子的厄密性由降算子的公式计算. 这里从略, 但为

了便于讨论,我们列出几个重要结论.

$$W(A_L(A_R); \vec{d}_r, d_r, \Delta b_r, b_r) = 0 \quad \text{除非 } \Delta b_r = 0, \quad (17)$$

$$W(C'; 12, \Delta b_r, b_r) = 0 \quad \text{除非 } \Delta b = -1, \quad (18)$$

$$W(C'; 21, \Delta b_r, b_r) = 0 \quad \text{除非 } \Delta b = 1. \quad (19)$$

二

我们考虑降算子 $E_{ij}(i > j)$ 作用于任意 Gelfand 态 $|(d_r)\rangle$,

$$E_{ij}|(d_r)\rangle = \sum_{(d'_r)} |(d'_r)\rangle \langle (d'_r)|E_{ij}|(d_r)\rangle. \quad (20)$$

我们的任务是要确定 (20) 式中所有那些系数非零的 Gelfand 态 $|(d'_r)\rangle$. 显然这将取决于态 $|(d_r)\rangle$ 和指标 i, j . 不难看出, $|(d_r)\rangle$ 的可能类型仅有下列九种:

- 1) $|\cdots d_i = 1, \cdots, d_i = 0, \cdots\rangle;$ 2) $|\cdots d_i = 2, \cdots, d_i = 0, \cdots\rangle,$
 $(n_j = 1, n_i = 0);$
- 3) $|\cdots d_i = 3, \cdots, d_i = 2, \cdots\rangle;$ 4) $|\cdots d_i = 3, \cdots, d_i = 1, \cdots\rangle,$
 $(n_j = 2, n_i = 1);$
- 5) $|\cdots d_i = 1, \cdots, d_i = 2, \cdots\rangle;$ 6) $|\cdots d_i = 2, \cdots, d_i = 1, \cdots\rangle;$
- 7) $|\cdots d_i = 1, \cdots, d_i = 1, \cdots\rangle;$ 8) $|\cdots d_i = 2, \cdots, d_i = 2, \cdots\rangle$
 $(n_j = 1, n_i = 1);$
- 9) $|\cdots d_i = 3, \cdots, d_i = 0\rangle,$
 $(n_j = 2, n_i = 0).$

下面分别对这九种类型加以讨论. 其方法是首先定义一个参考态 $|(d_r^0)\rangle$, 产生的态 $|(d'_r)\rangle$ 将由 $|(d_r^0)\rangle$ 的 Weyl 盘中第一列与第二列的轨道指标置换而得到. 为便于下面讨论, 我们将 $|(d_r^0)\rangle$ 中 i 与 j 之间的轨道指标按其步数定义两个集

$$Q_1 = \{k \in Q_1 \subset Q, d_k^0 = 1\},$$

$$Q_2 = \{l \in Q_2 \subset Q, d_l^0 = 2\}.$$

在 Weyl 盘中, Q_1 中的指标 k 出现在第一列, Q_2 的指标 l 出现在第二列. 并依指标的大小自上而下排列, 其间或许还间有双占据态的轨道指标.

A. 类型 2), 4) 和 6)

对于这三种类型的 Gelfand 态, 参考态 $|(d_r^0)\rangle$ 的定义为

$$d_j^0 = d_j - 2, \quad d_i^0 = d_i + 2, \quad d_r^0 = d_r \quad r \neq j, i. \quad (21)$$

这个态相当于在 $|(d_r)\rangle$ 的 Weyl 盘中, 将第二列的指标 j 换成了 i , 轨道指标的改变引起的 b 值变化不难用上节的方法确定,

$$b_r^0 = \begin{cases} b_r + 1 & r = j, j+1, \cdots, i-1, \\ b_r & r < j \text{ 或 } r \geq i. \end{cases} \quad (22)$$

我们注意到, (21) 式定义的参考态正是要找的 Gelfand 态中的一个, 因为在 (20) 式中, 它的系数为

$$\begin{aligned}
\langle (d_r^0) | E_{ij} | (d_r) \rangle &= W(A^L; 02(13), -1, b_i) \\
&\quad \cdot W(A_L; 20(31), 0, b_i) \cdot \prod_{r=j+1}^{i-1} W(C'; \tilde{d}_r^0 d_r, -1, b_r) \\
&\neq 0,
\end{aligned} \tag{23}$$

式中

$$\tilde{d}_r^0 d_r = 00, 11, 22, 33.$$

现在从 $|(d_r^0)\rangle$ 出发找其它的 $|(d_r')\rangle$. 显然只要适当地交换 $\mathcal{Q}_1$ 与 $\mathcal{Q}_2$ 中的指标, 就能找到全部所需要的态 $|(d_r')\rangle$. 先考虑只交换 $\mathcal{Q}_1$ 与 $\mathcal{Q}_2$ 的一个指标. 这样的交换共有 $\dim \mathcal{Q}_1 \cdot \dim \mathcal{Q}_2$ 个. 但是从 (8)–(9) 式和 (17)–(19) 式容易证明, 只有满足条件

$$k < l, k \in \mathcal{Q}_1, l \in \mathcal{Q}_2 \tag{24}$$

的交换产生的态才有非零的系数. 用 $|(d_k^0, d_l^0)(d_r^0)\rangle$ 代表交换得到的态.

其次, 考虑一次交换两个指标. 得到的态记为 $|(d_{k_2}^0, d_{l_2}^0)(d_{k_1}^0, d_{l_1}^0)(d_r^0)\rangle$. 因为

$$|(d_{k_1}^0, d_{l_2}^0)(d_{k_2}^0, d_{l_1}^0)(d_r^0)\rangle = |(d_{k_2}^0, d_{l_2}^0)(d_{k_1}^0, d_{l_1}^0)(d_r^0)\rangle, \tag{25}$$

不必考虑指标的交叉. 但是对于一次交换两个元素, 必须满足

$$l_2 > k_2 > l_1 > k_1. \tag{26}$$

不满足条件 (26) 式的交换, 例如 $l_2 > l_1 > k_2 > k_1$ 只能得到具有零系数的态.

同时交换的最大可能数显然不能超过 $\min(\mathcal{Q}_1, \mathcal{Q}_2) \equiv \min(\dim \mathcal{Q}_1, \dim \mathcal{Q}_2)$, 因此可将 (20) 式中的求和限定为

$$\sum_{s=0}^{\min(\mathcal{Q}_1, \mathcal{Q}_2)} \sum_{\dots > l_2 > k_2 > l_1 > k_1}^{\mathcal{Q}_1, \mathcal{Q}_2} \left[\prod_{t=0}^s (d_{k_t}^0, d_{l_t}^0) \right], \tag{27}$$

并有

$$(d_{k_0}^0, d_{l_0}^0) \equiv 1.$$

为了排除可能出现的非 Gelfand 态, 我们结合 (8) 式和 Gelfand 态必须满足的条件 ((7) 式), 在求和的每一项附加一个因子

$$H(k_t, l_t) = \begin{cases} \prod_{r=j}^{i-1} H(b_r^0) & t = 0, \\ \prod_{r=k_t}^{l_t-1} H(b_r^0 - 2) & t \neq 0. \end{cases} \tag{28}$$

这里 b_r^0 由 (22) 式确定. 而 $H(x)$ 是阶梯函数. 定义为

$$H(x) = \begin{cases} 0 & x < 0, \\ 1 & x \geq 0. \end{cases} \tag{29}$$

最后得到公式

$$\begin{aligned}
E_{ij} | (d_r) \rangle &= \sum_{s=0}^{\min(\mathcal{Q}_1, \mathcal{Q}_2)} \sum_{\dots > l_2 > k_2 > l_1 > k_1}^{\mathcal{Q}_1, \mathcal{Q}_2} \left[\prod_{t=0}^s H(k_t, l_t) (d_{k_t}^0, d_{l_t}^0) \right] | (d_r^0) \rangle \\
&\quad \cdot \left\langle \left[\prod_{t=0}^s H(k_t, l_t) (d_{k_t}^0, d_{l_t}^0) \right] (d_r^0) | E_{ij} | (d_r) \right\rangle.
\end{aligned} \tag{30}$$

例 1

$$E_{82}|(12121030)\rangle = \frac{1}{4} [3|(10121032)\rangle - |(10212031)\rangle] \\ + \frac{\sqrt{3}}{4} [(10211032)\rangle - |(10122031)\rangle].$$

B. 类型 1), 3) 和 5)

类似于 A 的处理, 对本组的三种类型, 若将 $|(d_r)\rangle$ 的 Weyl 盘中处于第一列的指标 j 换成 i , 得到 $|(d_r^0)\rangle$, 其中

$$d_j^0 = d_j - 1, \quad d_i^0 = d_i + 1, \quad d_r^0 = d_r \quad r \neq j, i. \quad (31)$$

相应地 b 值成为

$$b_r^0 = \begin{cases} b_r - 1 & r = j, j+1, \dots, i-1, \\ b_r & r < j \text{ 或 } r \geq i. \end{cases} \quad (32)$$

类似于在 A 中进行的分析, 得到

$$E_{ij}|(d_r)\rangle = \sum_{s=0}^{\min(Q_1, Q_2)} \sum_{\dots > k_2 > l_2 > k_1 > l_1}^{Q_1, Q_2} \left[\prod_{t=0}^s H'(k_t, l_t)(d_{k_t}^0, d_{l_t}^0) \right] |(d_r^0)\rangle \\ \cdot \left\langle \left[\prod_{t=0}^s H'(k_t, l_t)(d_{k_t}^0, d_{l_t}^0) \right] (d_r^0) | E_{ij} |(d_r)\rangle \right\rangle. \quad (33)$$

这里

$$H'(k_t, l_t) = \begin{cases} \prod_{r=j}^{i-1} H(b_r^0) & t = 0, \\ \prod_{r=l_t}^{k_t-1} H(b_r^0 + 2) & t \neq 0. \end{cases} \quad (34)$$

上式中的 b_r^0 由 (32) 式确定. 与 (30) 式比较, (33) 式的第二个和式中的求和次序已经颠倒过来. 另外, 我们还注意到, 与 A 不同, (31) 式定义的态可能不是 Gelfand 态.

如果它不是 Gelfand 态, 则因子 $H(k_0, l_0) = \prod_{r=j}^{i-1} H(b_r^0) = 0$. 而对 $t \neq 0$, 含有阶梯函数的因子实际上是多余的.

例 2

$$E_{71}|(1122110)\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} |(0112112)\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} |(0121112)\rangle \\ + \frac{1}{4} |(0112211)\rangle - \frac{1}{4\sqrt{3}} |(0112121)\rangle \\ - \frac{\sqrt{3}}{4} |(0121211)\rangle + \frac{1}{4} |(0121121)\rangle.$$

对于类型 9), 不论应用 (30) 式或 (33) 式, 都能得到正确的结果.

例 3

$$E_{82}|(03121030)\rangle = \frac{1}{\sqrt{8}} [3|(01121032)\rangle + \sqrt{3} |(01211032)\rangle \\ - \sqrt{3} |(01122031)\rangle - |(01212031)\rangle].$$

C 类型 7) 和 8)

对于类型 7), 我们不能用参考态 (31) 式定义一个新的参考态 $|(d_r^0)\rangle$,

$$d_j^0 = d_j - 1, \quad d_{l_m}^0 = d_{l_m} - 1, \quad d_i^0 = d_i + 2, \quad d_r^0 = d_r, \quad r \neq j, l_m, i. \quad (35)$$

这里 l_m 是态 $|(d_r)\rangle$ 中介于 j 与 i 之间且步数为 2 的轨道指标中 i 最小者. 由此定义可以得到

$$b_r^0 = \begin{cases} b_r - 1 & r = j, j+1, \dots, (l_m - 1); \\ b_r + 1 & r = l_m, l_m + 1, \dots, (i - 1); \\ b_r & r < j \text{ 或 } r \geq i. \end{cases} \quad (36)$$

在 $|(d_r^0)\rangle$ 中, 指标 l_m 已是 $\mathcal{Q}_1$ 的成员. 在 j 与 l_m 之间仅可能有属于 $\mathcal{Q}_1$ 的指标. 但这些指标 (如果存在) 不能参与交换. 简单的分析表明, 我们可以用类似于 (30) 式找到所需的 Gelfand 态.

$$E_{ij} |(d_r)\rangle = \sum_{s=0}^{\min(\mathcal{Q}'_1, \mathcal{Q}'_2)} \sum_{\dots > l_2 > k_2 > l_1 > k_1 \geq l_m}^{\mathcal{Q}'_1, \mathcal{Q}'_2} \left| \left[\prod_{t=0}^s H(k_t, l_t) (d_{k_t}^0, d_{l_t}^0) \right] (d_r^0) \right\rangle \cdot \left\langle \left[\prod_{t=0}^s H(k_t, l_t) (d_{k_t}^0, d_{l_t}^0) \right] (d_r^0) | E_{ij} |(d_r)\rangle \right\rangle, \quad (37)$$

式中 $\mathcal{Q}'_1$ 已排除 j 与 l_m 之间的轨道指标.

例 4

$$E_{83} |(11122101)\rangle = -\sqrt{\frac{2}{27}} |(11012103)\rangle + \sqrt{\frac{4}{27}} |(11021103)\rangle. \\ (l_m = 4)$$

对于类型 8), 参考态 $|(d_r^0)\rangle$, b 值及确定 Gelfand 态的公式分别为

$$d_j^0 = d_j - 2, \quad d_{k_M}^0 = d_{k_M} + 1, \quad d_i^0 = d_i + 1, \quad d_r^0 = d_r, \quad r \neq j, k_M, i; \quad (38)$$

$$b_r^0 = \begin{cases} b_r + 1 & r = j, j+1, \dots, (k_M - 1), \\ b_r - 1 & r = k_M, k_M + 1, \dots, (i - 1), \\ b_r & r < j \text{ 或 } r \geq i; \end{cases} \quad (39)$$

$$E_{ij} |(d_r)\rangle = \sum_{s=0}^{\min(\mathcal{Q}'_1, \mathcal{Q}'_2)} \sum_{k_M \geq l_1 > k_1 > \dots > l_1 > k_1}^{\mathcal{Q}'_1, \mathcal{Q}'_2} \left| \left[\prod_{t=0}^s H(k_t, l_t) (d_{k_t}^0, d_{l_t}^0) \right] (d_r^0) \right\rangle \cdot \left\langle \left[\prod_{t=0}^s H(k_t, l_t) (d_{k_t}^0, d_{l_t}^0) \right] (d_r^0) | E_{ij} |(d_r)\rangle \right\rangle. \quad (40)$$

以上各式中, k_M 是 $|(d_r)\rangle$ 中介于 j 与 i 之间, 且步数为 1 的最大轨道指标; 而 $\mathcal{Q}'_2$ 已排除 k_M 与 i 之间的指标, 因为这些指标 (均属于 $\mathcal{Q}_2$) 不能参与交换.

例 5

$$E_{72} |(1213212)\rangle = -\sqrt{\frac{3}{8}} |(1013223)\rangle - \sqrt{\frac{1}{8}} |(1023123)\rangle. \\ (k_M = 6)$$

三

对于升算子 $E_{ji}(j < i)$, 我们有与 (20) 式对应的公式

$$E_{ji}|(d_r)\rangle = \sum_{(d'_r)} |(d'_r)\rangle \langle (d'_r)|E_{ji}|(d_r)\rangle. \quad (41)$$

如果在 $|(d_r)\rangle$ 的九种类型中, 将指标 j 与 i 的步数交换, 并对交换后的 $|(d_r)\rangle$ 采用原来的类型编号. 则表 1 给出了确定全部 $|(d'_r)\rangle$ 所需要的公式编号.

表 1

类 型	降 算 子 E_{ij}			升 算 子 E_{ji}		
	参考态 定义	参考态 b 值	确定 $ (d'_r)\rangle$ 的公式	参考态 定义	参考态 b 值	确定 $ (d'_r)\rangle$ 的公式
1), 3), 5)	(31)	(32)	(33)	(31)*	(22)	(30)
2), 4), 6)	(21)	(22)	(30)	(21)	(32)	(33)
7)	(35)	(36)	(37)	(35)	(36)	(37)
8)	(38)	(39)	(40)	(38)	(39)	(40)

正如前面已经指出, 表 1 中未列入的类型 9) 既可划归第一行, 也可划归第二行. 表中参考态 $(x)'$ 可由参考态 (x) 中 i 与 j 交换得到, 例如由 (31) 式, 可得到

$$d_i^0 = d_i - 1, \quad d_j^0 = d_j + 1, \quad d_r^0 = d_r, \quad r \neq i, j. \quad (31)'$$

例 6

$$\begin{aligned} E_{17}|(0112211)\rangle &= -\frac{\sqrt{6}}{3}|(1112210)\rangle + \frac{1}{4}|(1211210)\rangle \\ &\quad - \frac{\sqrt{3}}{4}|(1212110)\rangle - \frac{\sqrt{3}}{12}|(1121210)\rangle \\ &\quad + \frac{1}{4}|(1122110)\rangle. \end{aligned}$$

有一简单方法可以初步检查所得结果是否正确. 因为^[9]

$$\begin{aligned} \langle (d_r)|E_{ji}E_{ij}|(d_r)\rangle &= \sum_{(d'_r)} \langle (d_r)|E_{ji}|(d'_r)\rangle \langle (d'_r)|E_{ij}|(d_r)\rangle \\ &= \sum_{(d'_r)} [\langle (d'_r)|E_{ij}|(d_r)\rangle]^2 \\ &= \langle (d_r)|E_{ji}E_{ij}|(d_r)\rangle_{x=0} + \langle (d_r)|E_{ji}E_{ij}|(d_r)\rangle_{x=1}, \end{aligned} \quad (42)$$

式中 x 为片断的总角动量, 我们注意到, 除类型 5) — 8) 外, 上式的第二项均为零. 而对于类型 5) — 8), 也仅当 $b_k \neq 1$ ($k \in Q_i$) 和 $b_r \neq 0$ ($r \in Q - Q_i$) 时, 第二项才不等于零. 至于上式的第一项, 不难证明

$$\langle (d_r)|E_{ji}E_{ij}|(d_r)\rangle_{x=0} = \frac{n_j}{n_i + 1}. \quad (43)$$

因此在多数情况下, 为了核实结果是否正确, 仅需验证系数的平方和是否与 (43) 式的右侧一致. 例如上列各例中, 仅例 4 中系数的平方和与 (43) 式不一致, 它的正确性还需计算 $x = 1$ 的项才能得到证实.

四

除了上述方法外, 我们显然还可以从生成元的对易关系

$$E_{ij} = [E_{i,j+1}, E_{j+1,j}] \quad (44)$$

递推地确定中间态. 但是, 这时必须考察 2^{i-j} 项, 更不利的是还不能立即确定 Gelfand 态最终形式. 也曾有人建议从 Weyl 盘确定中间态^[11]. 但因未得到中间态的限制条件, 也必须考察更多的项. 如果我们用 N 表示单占据轨道数, S 代表总自旋量子数, 则后一方法必须考察的项数为

$$\frac{N!(2S+1)}{\left(\frac{1}{2}N+S+1\right)! \left(\frac{1}{2}N-S\right)!}.$$

另外, 由于这一建议并未用片断值方法确定系数, 也限制了它的付诸实用.

利用本文方法计算生成元算子乘积矩阵元的过程是极其明显的. 实际上, 本文方法将中间态求和和片断值方法结合起来. 它直接脱胎于单个生成元的片断值计算. 当然, 用这一方法计算两个生成元乘积的矩阵元在一般情况下要比利用生成元乘积片断值计算繁一些. 但是, 如果将本文方法和后者结合, 对于三个及三个以上生成元乘积矩阵元的计算, 它的优点将显示出来. 这是因为这一方法的计算程序是统一的, 不依赖于生成元的数目. 此外, 我们可以确定右矢的中间态, 也可确定左矢的中间态, 或者两者并用, 即我们可以根据乘积中前后生成元的形式灵活地应用本文方法. 由于这一方法具有上述特点, 我们可以期望它将为多个生成元乘积矩阵元的计算提供一个可能的途径.

参 考 文 献

- [1] B. R. Brooks, H. F. Schaefer, *J. Chem. Phys.*, **70**(1979), 5092; B. R. Brooks, W. D. Laidig, P. Saxe, N. C. Handy, H. F. Schaefer, *Physica Scripta*, **21**(1980), 212.
- [2] R. Shepard, J. Simon, *Inter. J. Quant. Chem.*, **S14**(1980), 211.
- [3] Chen Jinquan, Wang Fang, Gao Meiquan, Yu Zurong, *Scientia Sinica*, **23**(1980), 1116; 文振翼, 物理学报, **23**(1979, 88; *Inter. J. Quant. Chem.*, (to be published).
- [4] G. Born, I. Shavitt, *J. Chem. Phys.*, **76**(1982), 558.
- [5] F. A. Matsen, *Inter. J. Quant. Chem.*, **S13**(1979), 305.
- [6] J. Paldus, *J. Chem. Phys.*, **61**(1974), 5321.
- [7] G. W. F. Drake, M. Schlesinger, *Phys. Rev. A*, **15**(1977), 1990.
- [8] I. Shavitt, *Inter. J. Quant. Chem.*, **S12**(1978), 5. In 'The Unitary Group for the Evaluation of Electronic Energy Matrix Elements', edited by J. Hinze, Springer-Verlag, (1981), p. 51.
- [9] J. Paldus, M. J. Boyle, *Physica Scripta*, **21**(1980), 295.
- [10] M. D. Gould, *J. Math. Phys.*, **22**(1981), 15.
- [11] S. Retrup, in 'The Unitary group for the Evaluation of Electronic Energy Matrix Elements', edited by J. Hinze, Springer-Verlag, (1981).

A NEW APPROACH FOR CALCULATING THE MATRIX ELEMENTS OF UNITARY GROUP GENERATOR PRODUCTS

WEN ZHEN-YI

(*Xian Mining Institute*)

ABSTRACT

In this paper we give a simple method by which all the Gelfand states can be obtained from the action of a generator on a Gelfand state. Combining with the method of calculating segment values, we suggest an approach to calculate the matrix elements of unitary group generator products.