FR 7900804

LYCEN 7910

Coefficients de Talmi et de Talmi et Moshinsky dans la base de l'oscillateur harmonique*

M Hage Hassan**

Institut de Physique Nucléaire (et I N2 P3)
Université Claude Bernard Lyon-1
43, Bd du 11 Novembre 1918, 69621 Villeurbanne, France

Abstract A new generating function for the harmonic oscillator spherical basis is constructed from the Laguerre polynomials and spherical harmonics generating functions. Recurrence relations of interest for calculating the Talmi coefficients are discussed. A new expression for the Talmi-Moshinsky coefficients is presented. New relations which are useful from a practical point of view, between Talmi-Moshinsky coefficients are established.

Résumé Une nouvelle fonction génératrice pour la base sphérique de l'oscillateur harmonique est construite à partir de la fonction génératrice des polynômes de Laguerre et de la fonction génératrice des harmoniques sphériques. Des formules de récurrence conduisant au calcul des coefficients de Talmi sont exposées. Une nouvelle expression des coefficients de Talmi et Moshinsky est présentée. De nouvelles relations entre les coefficients de Talmi et Moshinsky utiles du point de vue pratique sont établies.

* Ce travail constitue la troisième partie d'une thèse de Doctorat d'Etat en cours de rédaction

** Boursier du CNRS libanais

1 Introduction

La transformation d'une base de représentation en fonction des coordonnées de deux particules (représentation non couplée) en une base de représentation en fonction des coordonnées du centre de masse et des coordonnées relatives (représentation couplée) se rencontre dans de nombreux problèmes de physique nucléaire (voir par exemple Wong 1970). Une expression simple des éléments de la matrice de transformation (coefficients de Talmi et coefficients de Talmi et Moshinsky) se prêtant à des calculs numériques aisés présente donc un grand intérêt.

Diverses expressions des éléments de matrice de transformation, notamment celles des coefficients de Talmi et Moshinsky, ont été obtenues à partir de plusieurs méthodes (Talmi 1952, Moshinsky 1959, Baranger et Davies 1966, Kumar 1966, Wong 1970, Efros 1973 et Dobeš 1977). Parmi ces méthodes, celle de la fonction génératrice de la base sphérique de l'oscillateur harmonique a été employée par Kumar (1966) et Wong (1970). Généralisant la fonction génératrice de la base à une variable, Kumar a construit une fonction génératrice de la base sphérique de l'oscillateur harmonique et par des calculs simples a obtenu une fonction génératrice des coefficients de Talmi. Mais il faut noter que l'obtention de ces coefficients par l'approche de Kumar est loin d'être aisée. Dans son travail Wong a rencontré les mêmes difficultés pour calculer ces coefficients dans la base de l'oscillateur harmonique non centré.

Dans les méthodes précédentes les difficultés rencontrées proviennent du fait que le développement de la fonction génératrice de la base à trois dimensions de l'oscillateur harmonique s'effectue sur la base sphérique et fait intervenir des polynômes qui sont fonction des paramètres introduits pour construire la fonction génératrice. Il nous semble essentiel que le choix de la fonction génératrice de la base sphérique soit modifié afin que son développement fasse intervenir non pas des polynômes mais des monômes dont la puissance soit fonction des nombres quantiques de la base sphérique. La construction de la fonction génératrice des coefficients de Talmi et de la fonction génératrice des coefficients de Talmi et Moshinsky se fera alors par le même procédé que celui de Kumar. Mais l'intérêt de notre approche se révèlera dans le calcul des coefficients de Talmi et des coefficients de Talmi et Moshinsky qui se trouvera simplifié, d'une part, par le fait qu'il suffira de connaître la puissance des paramètres et, d'autre part, par le fait que nous pourrons utiliser les résultats de Schwinger (1965) et de Bargmann (1962) sur le groupe des rotations.

Dans notre travail la fonction génératrice de la base sphérique sera déduite de la fonction génératrice des polynômes de Laguerre et de la fonction génératrice des harmoniques sphériques. Nous utiliserons alors la fonction génératrice des symboles 3-jm obtenue par Schwinger (1965) pour construire la fonction génératrice de la représentation couplée. Ceci nous permettra d'obtenir une expression nouvelle des coefficients de Talmi et Moshinsky où n'apparaissent que des symboles 3-jm alors que l'expression récemment proposée par Dobeš (1977) fait intervenir une combinaison compliquée de symboles 6-j et 9-j. A partir de notre expression nous retrouverons le résultat particulier obtenu par Efros (1973) à l'aide d'une méthode différente.

Dans cette étude nous consacrons les préliminaires à la définition des coefficients de Talmi et des coefficients de Talmi et Moshinsky. Dans la première partie nous construisons la fonction génératrice de la base sphérique de l'oscillateur harmonique. La seconde partie est consacrée à la construction de la fonction génératrice de la base de la représentation couplée. La troisième partie présente la fonction génératrice des coefficients de Talmi et la méthode de calcul de ces coefficients. La méthode pour obtenir les coefficients de Talmi et Moshinsky est décrite dans la quatrième partie où nous comparons aussi nos résultats à ceux de Efros. Dans la cinquième partie nous donnons l'expression générale des coefficients de Talmi et Moshinsky. Enfin la dernière partie est consacrée à une relation entre ces coefficients.

2 Préliminaires

La base sphérique de l'oscillateur harmonique se définit dans la représentation $\{\vec{r}\}$ par :

$$|n\ell m(\vec{r})> = N_{n\ell}\left(\frac{1}{\pi}\right)^{\frac{3}{4}} \exp\left(-\frac{\vec{r}^{\,2}}{2}\right) L_n^{(\ell+\frac{1}{2})}(\vec{r}^{\,2})\, \mathcal{Y}_{\ell m}(\vec{r}), \qquad (2.1)$$

où $\vec{r} = (x, y, z)$, $L_n^{(\ell+\frac{1}{2})}(\vec{r}^{\,2})$ est un polynôme de Laguerre [voir Messiah (1965)], $\mathcal{Y}_{\ell m}(\vec{r})$ est une harmonique sphérique et

$$N_{n\ell} = \left[\frac{2\pi^{-\frac{3}{2}}\Gamma(n+1)}{\Gamma(n+\ell+\frac{3}{2})}\right]^{1/2}.$$

La fonction d'onde couplée de deux particules s'écrit dans la représentation $\{\vec{r}_1, \vec{r}_2\}$ sous la forme :

$$|n_1\ell_1(\vec{r}_1)\, n_2\ell_2(\vec{r}_2); \lambda\mu> = \sum_{m_1 m_2} <\ell_1\ell_2 m_1 m_2|\lambda\mu>|n_1\ell_1 m_1(\vec{r}_1)> \\ |n_2\ell_2 m_2(\vec{r}_2)>, \qquad (2.2)$$

où $<\ell_1\,\ell_2\,m_1\,m_2|\lambda\,\mu>$ désigne un coefficient de Clebsh et Gordan.
Pour simplifier nous utiliserons les abréviations :

$$|n(\vec{r})> = |n\ell m(\vec{r})>,$$

$$|n_1(\vec{r}_1)\; n_2(\vec{r}_2); \lambda\mu> = |n_1\ell_1(\vec{r}_1)\; n_2\ell_2(\vec{r}_2); \lambda\mu>,$$

$$|n_1(\vec{r}_1)\; n_2(\vec{r}_2)> = |n_1(\vec{r}_1)>\;|n_2(\vec{r}_2)>.$$

Les coordonnées $\vec{r}_1$ et $\vec{r}_2$ des deux particules sont liées à la coordonnée relative $\vec{R}_1$ et à la coordonnée du centre de masse $\vec{R}_2$ par une transformation orthogonale que nous écrivons sous la forme générale [voir Smirnov (1962)] :

$$\vec{r}_1 = \cos\varphi\, \vec{R}_1 + \sin\varphi\, \vec{R}_2, \qquad \vec{r}_2 = \sin\varphi\, \vec{R}_1 - \cos\varphi\, \vec{R}_2. \qquad (2.3)$$

La conservation de l'énergie et de la parité conduit aux règles de sélection suivantes :

$$2(n_1+n_2) + \ell_1 + \ell_2 = 2(N_1+N_2) + L_1 + L_2,$$

$$(-1)^{\ell_1+\ell_2} = (-1)^{L_1+L_2}.$$

Dans la base de la représentation couplée de deux particules le passage de la représentation $\{\vec{r}_1, \vec{r}_2\}$ à la représentation $\{\vec{R}_1, \vec{R}_2\}$ se fait à l'aide des coefficients de Talmi et Moshinsky qui s'écrivent $< n_1(\vec{r}_1)\; n_2(\vec{r}_2); \lambda\mu \mid N_1(\vec{R}_1)\; N_2(\vec{R}_2); \lambda\mu >$. Les coefficients de Talmi $< n_1(\vec{r}_1)\; n_2(\vec{r}_2) \mid N_1(\vec{R}_1)\; N_2(\vec{R}_2) >$ sont liés aux coefficients de Talmi et Moshinsky par la transformation :

$$< n_1(\vec{r}_1)\; n_2(\vec{r}_2) \mid N_1(\vec{R}_1)\; N_2(\vec{R}_2) >$$

$$= \sum_{\lambda} < \lambda\mu \mid \ell_1 \ell_2 m_1 m_2 > < \lambda\mu \mid L_1 L_2 M_1 M_2 > < n_1(\vec{r}_1)\, n_2(\vec{r}_2); \lambda\mu \mid N_1(\vec{R}_1)\; N_2(\vec{R}_2); \lambda\mu >. \tag{2.4}$$

3 Fonction génératrice de la base sphérique de l'oscillateur harmonique

En partant de la fonction génératrice des polynômes de Laguerre (Schwinger 1965) et de la fonction génératrice des harmoniques sphériques (Schwinger 1965) nous pouvons construire une fonction génératrice de la base sphérique de l'oscillateur harmonique. La fonction génératrice des harmoniques sphériques est donnée par :

$$\left(\frac{4\pi}{2\ell+1}\right)^{1/2} \sum_{m=-\ell}^{+\ell} \frac{\xi^{\ell+m}\, \eta^{\ell-m}}{\sqrt{(\ell+m)!\,(\ell-m)!}}\, \mathcal{Y}_{\ell m}(\vec{r}) = \frac{(\vec{b}\cdot\vec{r})^{\ell}}{2^{\ell}\, \ell!}, \tag{3.1}$$

où $\vec{b}$ est un vecteur de longueur nulle (c'est-à-dire $\vec{b}^2 = 0$) dont les composantes sont :

$b_x = -\xi^2 + \eta^2,$

$b_y = -i(\xi^2 + \eta^2),$

$b_z = 2\xi\eta.$

En adoptant les notations de Bargmann (1962), nous poserons :

$$\Phi_{\ell m}(\overset{\circ}{\xi}) = \frac{\xi^{\ell+m}\, \eta^{\ell-m}}{\sqrt{(\ell+m)!\,(\ell-m)!}}, \tag{3.2}$$

où $\xi^{\circ} = (\xi, \eta)$ et $\Phi_{\ell m}(\xi^{\circ})$ représente une base dans l'espace de Bargmann avec la mesure

$$d\mu(\xi^{\circ}) = \frac{e^{-(\xi\bar{\xi} + \eta\bar{\eta})}}{\pi^2} d\xi \, d\eta ,$$

où

$$\xi = x + i y ,$$

$$\eta = x' + i y' ,$$

avec

$$d\xi = dx \, dy ,$$

$$d\eta = dx' \, dy' .$$

La fonction génératrice des polynômes de Laguerre est donnée par (Schwinger 1965) :

$$\sum_{n=0}^{\infty} z^n L_n^{(r)}(\vec{r}^{\,2}) = \exp\left(\frac{-z\,\vec{r}^{\,2}}{1-z}\right) / (1-z)^{(r+1)} . \qquad (3.3)$$

La fonction génératrice de la base sphérique $G(z, \xi^{\circ}, r)$ s'obtient en multipliant (2.1) par $\left(\frac{4\pi}{2\ell+1}\right)^{1/2} \frac{z^n}{N_{n\ell}} \Phi_{\ell m}(\xi^{\circ})$, puis en effectuant la sommation par rapport à n, ℓ, m et enfin en utilisant les expressions (3.1) et (3.3). Ceci conduit à :

$$G(z, \xi^{\circ}, r) = \sum_{n\ell m} \left(\frac{4\pi}{2\ell+1}\right)^{1/2} \frac{z^n}{N_{n\ell}} \Phi_{\ell m}(\xi^{\circ}) \, | n(\vec{r}) >$$

$$= \left(\frac{1}{\pi}\right)^{3/4} \sum_{\ell} \left[\sum_{n} z^n L_n^{(\ell+\frac{1}{2})}(\vec{r}^{\,2}) \right] \left[\sum_{m=-\ell}^{+\ell} \left(\frac{4\pi}{2\ell+1}\right)^{1/2} \Phi_{\ell m}(\xi^{\circ}) \mathcal{Y}_{\ell m}(\vec{r}) \right] e^{-\frac{\vec{r}^{\,2}}{2}}$$

$$= \left(\frac{1}{\pi}\right)^{3/4} \sum_{\ell} \frac{e^{-\frac{\vec{r}^{\,2} z}{1-z}}}{(1-z)^{\ell+\frac{3}{2}}} \frac{(\vec{b}.\vec{r})^{\ell}}{2^{\ell} \ell !} e^{-\frac{\vec{r}^{\,2}}{2}}$$

$$= \left(\frac{1}{\pi}\right)^{\frac{3}{4}} \frac{e^{-\frac{\vec{r}^{\,2}}{2}\left(\frac{1+z}{1-z}\right) + \frac{\vec{b}\,.\,\vec{r}}{2(1-z)}}}{(1-z)^{3/2}}\,, \qquad (3.4)$$

Il faut noter que l'utilisation de notre fonction génératrice $G(z, \xi^o, r)$ et de la fonction génératrice utilisée par Kumar (1966), à savoir :

$$G(\vec{a}, \vec{r}) = \left(\frac{1}{\pi}\right)^{\frac{3}{4}} \exp\left(-\vec{a}^{\,2} + 2\,\vec{a}\,.\,\vec{r} - \frac{\vec{r}^{\,2}}{2}\right)$$

$$= \sum_{n\ell m} N_{n\ell} \frac{(-1)^n}{n!} \vec{a}^{\,2n} \mathcal{Y}_{\ell m}(\vec{a}) \,|n(\vec{r})\rangle, \qquad (3.5)$$

simplifie grandement le calcul des éléments de passage de la représentation cartésienne isotrope ou anisotrope à la représentation sphérique. Mais nous ne développerons pas ce point ici [voir Hage Hassan (1979)].

4 Fonction génératrice de la base de la représentation couplée

Pour calculer les coefficients de Talmi et Moshinsky il suffit de construire la fonction génératrice de la base de la représentation couplée. Nous la déduisons de la fonction génératrice de la base sphérique $G(z, \xi^o, r)$ et de la fonction génératrice $\Phi(\xi, \eta, \tau)$ des symboles 3-jm introduite par Schwinger (1965), à savoir :

$$\Phi(\xi, \eta, \tau) = \sum_{\substack{j_1 j_2 j_3 \\ m_1 m_2 m_3}} \Phi_{j_1 m_1}(\xi^1)\, \Phi_{j_2 m_2}(\xi^2)\, \Phi_{j_3 m_3}(\xi^3) \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \Phi_{j_1 j_2 j_3} \qquad (\mathrm{T})$$

$$= \exp\left(\tau_1 [\xi^2 \xi^3] + \tau_2 [\xi^3 \xi^1] + \tau_3 [\xi^1, \xi^2]\right), \qquad (4.1)$$

où

$$\xi^i = (\xi_i, \eta_i)$$

et

$$[\xi^i \xi^j] = \xi_i \eta_j - \eta_i \xi_j,$$

Nous exprimons les harmoniques sphériques en partant de la relation (3. 1) et en utilisant les propriétés de l'espace de Bargmann. Nous obtenons ainsi :

$$\int \overline{\Phi_{\ell m}(\xi)} \left(\frac{2\ell+1}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{(\vec{b}\cdot\vec{r})^{\ell}}{2^{\ell}\,\ell\,!}\; d\mu(\xi) = \mathcal{Y}_{\ell m}(\vec{r})\,. \qquad (4.2)$$

En remplaçant dans (2. 2) les coefficients de Clebsch et Gordan par les symboles 3-jm et les harmoniques sphériques par leur expression (4. 2), nous obtenons :

$$|n_1(\vec{r}_1)\, n_2(\vec{r}_2); \ell_3 m_3> = \frac{(-1)^{\ell_1-\ell_2+m_3}}{\pi^{3/2}} N_{n_1\ell_1} N_{n_2\ell_2} \frac{\sqrt{\prod_{i=1}^{2}(2\ell_i+1)}}{4\pi}$$

$$\int \sum_{m_1 m_3} \begin{pmatrix} \ell_1 & \ell_2 & \ell_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \overline{\Phi_{\ell_1 m_1}(\xi^1)}\; \overline{\Phi_{\ell_2 m_2}(\xi^2)}\; e^{-\frac{\vec{r}_1^{\,2}+\vec{r}_2^{\,2}}{2}}$$

$$L_{n_1}^{(\ell_1+\frac{1}{2})}(\vec{r}_1^{\,2})\, L_{n_2}^{(\ell_2+\frac{1}{2})}(\vec{r}_2^{\,2})\, \frac{(\vec{b}_1\cdot\vec{r}_1)^{\ell_1}}{2^{\ell_1}\,\ell_1\,!}\; \frac{(\vec{b}_2\cdot\vec{r}_2)^{\ell_2}}{2^{\ell_2}\,\ell_2\,!}$$

$$d\mu(\xi^1)\, d\mu(\xi^2)\,, \qquad (4.3)$$

En multipliant (4. 3) par

$$4\pi\, \frac{z_1^{n_1}\; z_2^{n_2}}{N_{n_1\ell_1}\, N_{n_2\ell_2}}\; \frac{(-1)^{\ell_1-\ell_2+m_3}}{\sqrt{\prod_{i=1}^{3}(2\ell_i+1)}}\; \overline{\Phi_{\ell_3 m_3}(\xi^3)}\; \overline{\Phi_{\ell_1\ell_2\ell_3}(\tau)}\,,$$

et en effectuant la sommation sur n_1, ℓ_2, n_2, ℓ_2, ℓ_3, m_3 nous obtenons la fonction génératrice de la représentation couplée que nous noterons $G(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$:

$$G(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \sum_{\substack{n_1 \ell_1 \\ n_2 \ell_2 \\ m_3 \ell_3}} 4\pi \frac{z_1^{n_1} z_2^{n_2}}{N_{n_1 \ell_1} N_{n_2 \ell_2}} \frac{(-1)^{\ell_1 - \ell_2 + m_3}}{\sqrt{\prod_{i=1}^{3} (2\ell_i + 1)}}$$

$$\overline{\Phi_{\ell_3 m_3}(\xi^3)} \; \overline{\Phi_{\ell_1 \ell_2 \ell_3}(\tau)} \; | n_1 (\vec{r}_1) \; n_2 (\vec{r}_2); \ell_3 m_3 >$$

$$= \int \Big[\sum_{\substack{\ell_1 \ell_2 \ell_3 \\ m_1 m_2 m_3}} \begin{pmatrix} \ell_1 & \ell_2 & \ell_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \overline{\Phi_{\ell_1 \ell_2 \ell_3}(\tau)} \prod_{i=1}^{3} \overline{\Phi_{\ell_i m_i}(\xi^i)} \Big]$$

$$\prod_{i=1}^{2} G(z_i, \xi_i, r_i) \, d\mu(\xi^1) \, d\mu(\xi^2) . \qquad (4.4)$$

Dans (4.4) nous pouvons remplacer la quantité entre crochets par l'expression (4.1) puisque le développement des fonctions génératrices $G(z_i, \xi_i, r_i)$ s'effectue sur des valeurs entières de ℓ_1 et ℓ_2 et que de ce fait la valeur de l'intégrale (4.4) ne sera pas modifiée. Nous obtenons ainsi :

$$G(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \int \overline{\Phi(\xi, \eta, \tau)} \prod_{i=1}^{2} G(z_i, \xi^i, r_i) \, d\mu(\xi^1) \, d\mu(\xi^2). \qquad (4.5)$$

Notons que ce procédé peut facilement être généralisé pour obtenir la fonction génératrice de la représentation couplée de plusieurs particules [voir Hage Hassan (1979)].

5 *Coefficients de Talmi et coefficients de Talmi et Moshinsky*

5.1 Coefficients de Talmi

En utilisant la fonction génératrice de la base sphérique (3.4) nous pouvons obtenir la fonction génératrice $G(s, \overline{S}, \xi, \overline{\xi'})$ des coefficients de Talmi. Pour cela nous remplaçons dans l'expression (2.4) $|n_1(\vec{r}_1)>$, $|n_2(\vec{r}_2)>$, $|N_1(\vec{R}_1)>$ et $|N_2(\vec{R}_2)>$ respectivement par leur fonction génératrice $G(s_1, \xi^1, r_1)$, $G(s_2, \xi^2, r_2)$, $G(S_1, \xi'^1, R_1)$ et $G(S_2, \xi'^2, R_2)$. Nous avons :

$$G(s, \bar{S}, \xi, \bar{\xi}') = \int \prod_{i=1}^{2} \left[G(s_i, \xi^i, r_i)\, \overline{G(S_i, \xi'^i, R_i)}\, d^3 \vec{R}_i \right]$$

$$= \iint \left[\frac{1}{\pi^2 (1 - s_1)(1 - s_2)(1 - \bar{S}_1)(1 - \bar{S}_2)} \right]^{\frac{3}{2}}$$

$$\exp \left[- \frac{\vec{r}_1^{\,2}}{2} \left(\frac{1 + s_1}{1 - s_1} \right) + \frac{\vec{a}_1 \cdot \vec{r}_1}{2(1 - s_1)} - \frac{\vec{r}_2^{\,2}}{2} \left(\frac{1 + s_2}{1 - s_2} \right) + \frac{\vec{a}_2 \cdot \vec{r}_2}{2(1 - s_2)} \right.$$

$$\left. - \frac{\vec{R}_1^{\,2}}{2} \left(\frac{1 + \bar{S}_1}{1 - \bar{S}_1} \right) + \frac{\vec{\bar{A}}_1 \cdot \vec{R}_1}{2(1 - \bar{S}_1)} - \frac{\vec{R}_2^{\,2}}{2} \left(\frac{1 + \bar{S}_2}{1 - \bar{S}_2} \right) + \frac{\vec{\bar{A}}_2 \cdot \vec{R}_2}{2(1 - \bar{S}_2)} \right] d^3 \vec{R}_1\, d^3 \vec{R}_2 \,, \tag{5.1}$$

où $\vec{a}_1$, $\vec{a}_2$, $\vec{A}_1$ et $\vec{A}_2$ sont des vecteurs de longueur nulle construits à partir des couples (ξ^i, η^i) et (ξ'^i, η'_i) avec $i = 1, 2$.

Après avoir effectué l'intégration de l'expression (5.1), nous obtenons :

$$G(s, \bar{S}, \xi, \bar{\xi}') = \exp \left[\frac{Q(s, \bar{S}, \xi, \bar{\xi}')}{8\, P(s, \bar{S})} \right] \Big/ \left[P(s, \bar{S}) \right]^{\frac{3}{2}} , \tag{5.2}$$

avec

$$P(s, \bar{S}) = 1 - \sin^2\varphi (s_1 \bar{S}_2 + s_2 \bar{S}_1) - \cos^2\varphi (s_2 \bar{S}_2 + s_1 \bar{S}_1) + s_1 s_2 \bar{S}_1 \bar{S}_2 \,,$$

et

$$Q(s, \bar{S}, \xi, \bar{\xi}') = \vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 (\bar{S}_2 - \bar{S}_1) \sin\varphi \cos\varphi + \vec{a}_1 \cdot \vec{\bar{A}}_1 (1 - \bar{S}_2 s_2) \cos\varphi$$
$$+ \vec{a}_1 \cdot \vec{\bar{A}}_2 \sin\varphi (1 - s_2 \bar{S}_1) + \vec{a}_2 \cdot \vec{\bar{A}}_1 (1 - \bar{S}_2 s_1) \sin\varphi$$
$$- \vec{a}_2 \cdot \vec{\bar{A}}_2 \cos\varphi (1 - s_1 \bar{S}_1) + \vec{\bar{A}}_1 \cdot \vec{\bar{A}}_2 (s_2 - s_1) \sin\varphi \cos\varphi ,$$

où

$$\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 = -2[\xi^1 \xi^2]^2, \quad \vec{a}_1 \cdot \vec{A}_1 = 2(\xi^1 \overline{\xi'^1})^2, \quad \vec{a}_1 \cdot \vec{A}_2 = 2(\xi^1 \overline{\xi'^2})^2,$$

$$\vec{a}_2 \cdot \vec{A}_1 = 2(\xi^2 \overline{\xi'^1})^2, \quad \vec{a}_2 \cdot \vec{A}_2 = 2(\xi^2 \overline{\xi'^2})^2, \quad \vec{A}_1 \cdot \vec{A}_2 = -2[\overline{\xi'^1}\, \overline{\xi'^2}]^2 .$$

La fonction génératrice des coefficients de Talmi (5. 2) présente un grand intérêt pour le calcul des coefficients de Talmi et Moshinsky que nous exposerons dans le prochain paragraphe. Le calcul des coefficients de Talmi peut être déduit de la relation (2. 4) dans laquelle il suffit de reporter l'expression des coefficients de Talmi et Moshinsky. Mais ici nous allons exposer une autre manière d'obtenir les coefficients de Talmi en partant de leur fonction génératrice (5. 2). Pour cela nous remplaçons dans l'expression (5. 2) $\vec{a}_1$, $\vec{a}_2$, $\vec{A}_1$ et $\vec{A}_2$ respectivement par $\alpha\vec{a}_1$, $\alpha\vec{a}_2$, $\alpha\vec{A}_1$ et $\alpha\vec{A}_2$, α étant un paramètre, puis nous restreignons le développement de $G(s, \overline{S}, \xi, \overline{\xi'})$ aux coefficients de Talmi tels que $\ell_1 + \ell_2 + L_1 + L_2 = \sigma$, σ étant un nombre entier. Ce développement de $G(s, \overline{S}, \xi, \overline{\xi'})$ s'écrit :

$$\frac{[Q(s, \overline{S}, \xi, \overline{\xi'})]^{\sigma}}{\sigma!\, 2^{3\sigma}\, [P(s, \overline{S})]^{\sigma+\frac{3}{2}}} , \tag{5. 3}$$

avec

$$[Q(s, \overline{S}, \xi, \overline{\xi'})]^{\sigma} = \sum_{\substack{n_1 n_2 \\ \ell_1 \ell_2 \\ m_1 m_2 \\ M_1 M_2}} \begin{bmatrix} n_1 & n_2 & N_1 & N_2 \\ \ell_1 & \ell_2 & L_1 & L_2 \\ m_1 & m_2 & M_1 & M_2 \end{bmatrix} \Phi_{\ell_1 m_1}(\xi^1)\, \Phi_{\ell_2 m_2}(\xi^2)\, \overline{\Phi_{L_1 M_1}(\xi'^1)}\, \overline{\Phi_{L_2 M_2}(\xi'^2)}\, s_1^{n_1} s_2^{n_2} \overline{S}_1^{N_1} \overline{S}_2^{N_2} \tag{5. 4}$$

et

$$\frac{1}{[P(s, \overline{S})]^{\sigma+\frac{3}{2}}} = \sum_{\substack{n'_1 n'_2 \\ N'_1 N'_2}} P^{(n'_1,\ n'_2)}_{(N'_1,\ N'_2)}(\sigma)\, s_1^{n'_1} s_2^{n'_2} S_1^{N'_1} S_2^{N'_2} . \tag{5. 5}$$

Pour calculer les coefficients de Talmi il suffit de reporter les expressions (5.4) et (5.5) dans l'expression (5.3). Il est donc nécessaire de connaître les coefficients $\begin{bmatrix} n_1 & n_2 & N_1 & N_2 \\ \ell_1 & \ell_2 & L_1 & L_2 \\ m_1 & m_2 & M_1 & M_2 \end{bmatrix}$ du développement (5.4) et les polynômes $P^{(n'_1\,,\;n'_2)}_{(N'_1,\;N'_2)}\,(\varphi)$. Nous déterminons les polynômes en développant $\dfrac{1}{[P(s,\overline{S})]^{\sigma+\frac{3}{2}}}$ ce qui nous donne :

$$P^{(n'_1\,,\;n'_2)}_{(N'_1,\;N'_2)}(\varphi)=\sum_m(-1)^m\frac{(\sigma'-m)!}{m!}\left[{r \atop \sigma'-n_1}\right](\sin\varphi)^{2(N'_1-n'_1)}$$

$$(\cos\varphi)^{2(n'_1+N'_2)-4m}\sum_i\frac{(\tan\varphi)^{4i}}{i!(N'_1-n'_1+i)!(N'_2-m-i)(n'_1-m-i)!}, \tag{5.6}$$

où

$$\sigma'=n'_1+n'_2=N'_1+N'_2\,,\quad r=\sigma+\frac{3}{2}\,,\quad \left[{r \atop \sigma'-m}\right]=\frac{(r+\sigma'-m-1)!}{(r-1)!\,(\sigma'-m)!}\,.$$

Les coefficients $\begin{bmatrix} n_1 & n_2 & N_1 & N_2 \\ \ell_1 & \ell_2 & L_1 & L_2 \\ m_1 & m_2 & M_1 & M_2 \end{bmatrix}$ se calculent, soit en développant le premier membre de l'expression (5.4) et en établissant ensuite la comparaison avec le second membre de cette même expression, soit en utilisant des formules de récurrence. Les formules de récurrence s'obtiennent en multipliant l'expression (5.4) par $\frac{t^\sigma}{\sigma!}$, puis en effectuant la sommation par rapport à σ, et en utilisant la dérivation par rapport à chaque paramètre, à savoir ξ_1, η_1, ξ_2, η_2, $\overline{\xi'}_1$, $\overline{\eta'}_1$, $\overline{\xi'}_2$, $\overline{\eta'}_2$, s_1, s_2, $\overline{S}_1$, $\overline{S}_2$. Ainsi :

$$\frac{\partial}{\partial\xi_1}\,e^{t\,Q(s,\,\overline{S},\,\xi,\,\overline{\xi'})}=t\left(\frac{\partial}{\partial\xi_1}Q(s,\overline{S},\xi,\overline{\xi'})\right)e^{t\,Q(s,\,\overline{S},\,\xi,\,\overline{\xi'})}, \tag{5.7}$$

Dans (5.7) nous remplaçons $e^{t\,Q(s,\,\overline{S},\,\xi,\,\overline{\xi'})}$ par son développement déduit de l'expression (5.4) puis nous comparons les deux membres de l'expression (5.7) ainsi obtenue ce qui nous donne la formule de récurrence :

$$\frac{\sqrt{\ell_1+m_1}}{(\ell_1+\ell_2+L_1+L_2)} \begin{bmatrix} n_1 & n_2 & N_1 & N_2 \\ \ell_1 & \ell_2 & L_1 & L_2 \\ m_1 & m_2 & M_1 & M_2 \end{bmatrix}$$

$$= + \begin{bmatrix} n_1 & n_2 & N_1 - 1 & N_2 \\ \ell_1 - 1 & \ell_2 - 1 & L_1 & L_2 \\ m_1 - 1 & m_2 + 1 & M_1 & M_2 \end{bmatrix} \sqrt{(\ell_1+m_1-1)(\ell_2-m_2)(\ell_2-m_2-1)} \sin\varphi \cos\varphi$$

$$- \begin{bmatrix} n_1 & n_2 & N_1 - 1 & N_2 \\ \ell_1 - 1 & \ell_2 - 1 & L_1 & L_2 \\ m_1 & m_2 & M_1 & M_2 \end{bmatrix} \sqrt{(\ell_1-m_1)(\ell_2+m_2)(\ell_2-m_2)} \sin\varphi \cos\varphi$$

$$- \begin{bmatrix} n_1 & n_2 & N_1 & N_2 - 1 \\ \ell_1 - 1 & \ell_2 - 1 & L_1 & L_2 \\ m_1 - 1 & m_2 + 1 & M_1 & M_2 \end{bmatrix} \sqrt{(\ell_1+m_1-1)(\ell_2-m_2)(\ell_2-m_2-1)} \sin\varphi \cos\varphi$$

$$+ \begin{bmatrix} n_1 & n_2 & N_1 & N_2 - 1 \\ \ell_1 - 1 & \ell_2 - 1 & L_1 & L_2 \\ m_1 & m_2 & M_1 & M_2 \end{bmatrix} \sqrt{(\ell_1-m_1)(\ell_2+m_2)(\ell_2-m_2)} \sin\varphi \cos\varphi$$

$$+ \begin{bmatrix} n_1 & n_2 & N_1 & N_2 \\ \ell_1 - 1 & \ell_2 & L_1 - 1 & L_2 \\ m_1 - 1 & m_2 & M_1 - 1 & M_2 \end{bmatrix} \sqrt{(\ell_1+m_1-1)(L_1+M_1)(L_1+M_1-1)} \cos\varphi$$

$$+ \begin{bmatrix} n_1 & n_2 & N_1 & N_2 \\ \ell_1 - 1 & \ell_2 & L_1 - 1 & L_2 \\ m_1 & m_2 & M_1 & M_2 \end{bmatrix} \sqrt{(\ell_1-m_1)(L_1+M_1)(L_1-M_1)} \cos\varphi$$

$$- \begin{bmatrix} n_1 & n_2 - 1 & N_1 & N_2 - 1 \\ \ell_1 - 1 & \ell_2 & L_1 - 1 & L_2 \\ m_1 - 1 & m_2 & M_1 - 1 & M_2 \end{bmatrix} \sqrt{(\ell_1+m_1-1)(L_1+M_1)(L_1+M_1-1)} \cos\varphi$$

$$- \begin{bmatrix} n_1 & n_2 - 1 & N_1 & N_2 - 1 \\ \ell_1 - 1 & \ell_2 & L_1 - 1 & L_2 \\ m_1 & m_2 & M_1 & M_2 \end{bmatrix} \sqrt{(\ell_1-m_1)(L_1+M_1)(L_1-M_1)} \cos\varphi$$

$$+ \begin{bmatrix} n_1 & n_2 & N_1 & N_2 \\ \ell_1 - 1 & \ell_2 & L_1 & L_2 - 1 \\ m_1 - 1 & m_2 & M_1 & M_2 - 1 \end{bmatrix} \sqrt{(\ell_1+m_1)(L_1+M_1)(L_1+M_1-1)} \sin\varphi$$

$$+ \begin{bmatrix} n_1 & n_2 & N_1 & N_2 \\ \ell_1 - 1 & \ell_2 & L_1 & L_2 - 1 \\ m_1 & m_2 & M_1 & M_2 \end{bmatrix} \sqrt{(\ell_1-m_1)(L_2+M_2)(L_2-M_2)} \sin\varphi$$

$$- \begin{bmatrix} n_1 & n_2 - 1 & N_1 - 1 & N_2 \\ \ell_1 - 1 & \ell_2 & L_1 & L_2 - 1 \\ m_1 - 1 & m_2 & M_1 & M_2 - 1 \end{bmatrix} \sqrt{(\ell_1+m_1-1)(L_2+M_2)(L_2+M_2-1)} \sin\varphi$$

$$- \begin{bmatrix} n_1 & n_2 - 1 & N_1 - 1 & N_2 \\ \ell_1 - 1 & \ell_2 & L_1 & L_2 - 1 \\ m_1 & m_2 & M_1 & M_2 \end{bmatrix} \sqrt{(\ell_1-m_1)(L_2+M_2)(L_2-M_2)} \sin\varphi \,. \tag{5.8}$$

En effectuant la dérivation de $e^{t\,Q\,(s,\ \overline{S},\ \xi,\ \overline{\xi'})}$ par rapport à chacun des paramètres considérés $\eta_1, \xi_2, \eta_2, \ldots$ nous obtenons des expressions analogues à l'expression (5.7). Et en utilisant le procédé développé précédemment nous déduirons de ces expressions toutes les autres formules de récurrence.

5.2 Coefficients de Talmi et Moshinsky

La fonction génératrice G_{TM} des coefficients de Talmi et Moshinsky est le recouvrement de la fonction génératrice de la représentation couplée dans la représentation $(\vec{R}_1, \vec{R}_2)$ et dans la représentation $(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ [voir (4.5)]. Ainsi à l'aide de (4.5) et de (4.4) nous pouvons écrire l'expression de G_{TM} sous la forme intégrale :

$$G_{TM} = \int G(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\ \overline{G(\vec{R}_1, \vec{R}_2)}\ d\vec{R}_1\ d\vec{R}_2$$

$$= \int \overline{\Phi(\xi, \eta, \tau)}\ \Phi(\xi', \eta', \tau') \int \prod_{i=1}^{2} \left(G(s_i, \xi^i, r_i)\ \overline{G(s_i, \xi'^i, R_i)}\right) d\vec{R}_1\ d\vec{R}_2 \prod_{i=1}^{2} du(\xi^i)\ du(\xi'^i), \qquad (5.9)$$

ou sous la forme développée en fonction des coefficients de Talmi et Moshinsky :

$$G_{TM} = \sum_{\substack{n_1 n_2 \ell_1 \ell_2 \\ N_1 N_2 L_1 L_2 \\ \lambda \mu}} \frac{(4\pi)^2}{2\lambda+1} \prod_{i=1}^{2} \left(\frac{s_i^{n_i}\ \overline{S_i^{N_i}}}{N_{n_i \ell_i}\ N_{N_i L_i}} \right) \overline{\Phi_{\lambda\mu}(\xi^3)}\ \Phi_{\lambda\mu}(\xi'^3)\ \overline{\Phi_{\ell_1 \ell_2 \lambda}(\tau)}\ \Phi_{L_1 L_2 \lambda}(\tau')$$

$$\frac{1}{\sqrt{\prod_{i=1}^{2} [\ell_i][L_i]}} < N_1(\vec{R}_1)\ N_2(\vec{R}_2); \lambda\mu \mid n_1(\vec{r}_1)\ n_2(\vec{r}_2); \lambda\mu >, \qquad (5.10)$$

avec

$[L_i] = 2\,L_i + 1$ et $[\ell_i] = 2\,\ell_i + 1$.

La quantité $\int \prod_{i=1}^{2} (G(s_i, \xi^i, r_i)\ \overline{G(S_i, \xi'^i, R_i)})\ d\vec{R}_1\ d\vec{R}_2$ représente la fonction génératrice des coefficients de Talmi et nous la remplaçons par son expression (5.2).

L'intégration de (5.9) est difficile et nous résoudrons ce problème en développant tout d'abord $G(s, \overline{S}, \xi, \overline{\xi'})$ et en effectuant ensuite l'intégration. Le développement de $G(s, \overline{S}, \xi, \overline{\xi'})$ s'écrit :

$$G(s, \overline{S}, \xi, \overline{\xi'}) = \sum_{ijk\ell mn} \frac{(-1)^m}{2^{2\sigma}} \frac{\{1\}}{i!\,j!\,k!\,\ell!\,m!\,n!} \frac{\{2\}}{[P(s, \overline{S})]^{\sigma+\frac{3}{2}}} (\sin\varphi)^{i+k+\ell+n} (\cos\varphi)^{i+j+m+n}, \qquad (5.11)$$

où

$$\{1\} = [\xi^1 \xi^2]^{2i} (\xi^1 \overline{\xi'^1})^{2j} (\xi^1 \overline{\xi'^2})^{2k} (\xi^2 \overline{\xi'^1})^{2\ell} (\xi^2 \overline{\xi'^2})^{2m} [\overline{\xi'^1}\, \overline{\xi'^2}]^{2n}, \qquad (5.12)$$

$$\{2\} = (\overline{S}_1 - \overline{S}_2)^i (1 - \overline{S}_2 s_2)^j (1 - s_2 \overline{S}_1)^k (1 - s_1 \overline{S}_2)^\ell (1 - s_1 \overline{S}_1)^m (s_1 - s_2)^n \qquad (5.13)$$

$$\sigma = i + j + k + \ell + m + n .$$

La détermination des coefficients de Talmi et Moshinsky exige que les indices de sommation dans l'expression (5.11) soient les mêmes que ceux qui interviennent dans l'expression (5.10). Compte-tenu du fait que les modules ξ^1, $\overline{\xi'^1}$, ξ^2 et $\overline{\xi'^2}$ ont respectivement pour exposants $2\ell_1$, $2\ell_2$, $2L_1$ et $2L_2$, nous remplaçons dans l'expression (5.11) la sommation sur i, j, k, ℓ, m, n par une sommation sur ℓ_1, ℓ_2, L_1, L_2, i, j telle que :

$$i + j + k = \ell_1, \qquad j + \ell + n = L_1, \qquad k = \ell_1 - i - j,$$

$$i + \ell + m = \ell_2, \qquad k + m + n = L_2, \qquad \ell = L_1 + \frac{J_1 - J_2}{2} - i - j,$$

$$m = \Delta + j, \qquad \Delta = \frac{1}{2}(L_2 - L_1 + \ell_2 - \ell_1),$$

et

$$J_1 = \ell_1 + \ell_2 + \lambda, \quad J_2 = L_1 + L_2 + \lambda, \quad n = \frac{J_2 - J_1}{2} + i. \qquad (5.14)$$

Dans l'expression (5.9) nous remplaçons $G(s, \overline{S}, \xi, \overline{\xi'})$ par l'expression ainsi obtenue. Nous utilisons de plus :

$$\int \overline{\Phi(\xi,\eta,\tau)}\;\Phi(\xi',\eta',\tau')\,e^{E(t)}\prod_{i=1}^{2}\left(du(\xi^i)\,du(\xi'^1)\right)$$

$$= \frac{1}{S^2}\exp\Big[\frac{(\overrightarrow{\xi^3\xi'^3})}{S}\left(-\tau'_2\overline{\tau}_1 t_4+\tau'_2\overline{\tau}_2 t_2+\tau'_1\overline{\tau}_1 t_5-\tau'_1\overline{\tau}_2 t_3\right)\Big] \qquad (5.15)$$

avec

$$E(t) = t_1[\xi^1\xi^2] + t_2[\xi^1\overline{\xi'^1}] + t_3(\xi^1\overline{\xi'^2}) + t_4(\xi^2\overline{\xi'^1}) + t_5(\xi^2\overline{\xi'^2}) + t_6[\overline{\xi'^1}\,\overline{\xi'^2}],$$

où t_1, t_2, t_3, t_4, t_5 et t_6 sont des paramètres et

$$S = 1 - \overline{\tau}_3 t_1 - \tau'_3 t_6 + \tau'_3\overline{\tau}_3(t_1 t_6 - t_2 t_5 + t_3 t_4).$$

Ainsi nous pouvons effectuer l'intégration dans l'expression (5.9).
En tenant compte de la relation ci-dessous [voir Racah (1942)] :

$$\sum_s (-1)^s \frac{(t-s)!}{s!\,(x-s)!\,(z-s)!} = \frac{(t-x)!\,(t-z)!}{x!\,z!\,(t-x-z)!}$$

et de l'expression des coefficients de Clebsch et Gordan [voir Edmonds (1957)] nous obtenons :

$$G_{TM} = \sum_{\substack{\ell_1\ell_2 L_1 L_2\\ \lambda\mu}} \frac{(-1)^{J_2}(J_1+1)!\,(J_2+1)!}{2^{2\sigma}\sqrt{(J_2-2L_1)!\,(J_2-2L_2)!\,(J_1-2\ell_1)!\,(J_1-2\ell_2)!}}\,\frac{1}{2\lambda+1}$$

$$\sum_{ij}(-1)^m \frac{\sqrt{(2j)!\,(2k)!\,(2\ell)!\,(2m)!}}{\sqrt{(J_1-2i+1)!\,(J_1-2\lambda-2i)!}}\;\frac{\ell}{i!\,j!\,k!\,\ell!\,m!\,n!}$$

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3\\ m_1 & m_2 & m_3\end{pmatrix}\frac{\{2\}}{[P(s,\overline{S})]^{\sigma+\frac{3}{2}}}(\sin\vartheta)^{i+k+\ell+n}(\cos\vartheta)^{i+j+m+n}$$

$$\frac{(\xi'_3\overline{\xi}_3)^{\lambda+u}}{(\lambda+u)!}\;\frac{(\eta'_3\overline{\eta}_3)^{\lambda+u}}{(\lambda+u)!}$$

$$\overline{\tau_1^{J_1-2\ell_1}\tau_2^{J_2-2\ell_2}\tau_3^{J_1-2\lambda}}\;\tau_1'^{\,J_2-2L_1}\tau_2'^{\,J_2-2L_2}\tau_3'^{\,J_2-2\lambda}, \qquad (5.16)$$

avec

$$\left.\begin{array}{lll} j_1 = \dfrac{J_1 - J_2}{2} + L_1 - i\,, & j_2 = \dfrac{J_1 - J_2}{2} + L_2 - i\,, & j_3 = \lambda\,. \\ m_1 = j_1 - 2\,j\,, & m_2 = 2\,m - j_2\,, & m_3 = -\ell_2 + \ell_1\,. \end{array}\right\} \qquad (5.\,17)$$

Nous prenons pour développement de $\dfrac{\{2\}}{[P(s,\overline{S})]^{\frac{3}{2}+\sigma}}$ l'expression suivante :

$$\frac{\{2\}}{[P(s,\overline{S})]^{\sigma+\frac{3}{2}}} = \sum C^{i\,j}_{(N_1 N_2,\; n_1 n_2)}\; \overline{S_1}^{N_1}\; \overline{S_2}^{N_2}\; s_1^{n_1}\; s_2^{n_2}\,, \qquad (5.\,18)$$

Nous reportons l'expression de ce développement dans (5. 16) et nous comparons le résultat obtenu à l'expression (5. 10) ce qui nous permet d'obtenir l'expression formelle des coefficients de Talmi et Moshinsky :

$$\langle N_1(\vec{R}_1)\, N_2(\vec{R}_2);\, \lambda\mu\, |\, n_1(\vec{r}_1)\, n_2(\vec{r}_2);\, \lambda\mu \rangle = \frac{(-1)^{J_2}}{(4\pi)^2\, 2^{2\sigma}}$$

$$\sqrt{[\ell_1]\,[\ell_2]\,[L_1]\,[L_2]\,(J_1 - 2\lambda)!\,(J_2 - 2\lambda)!\,(J_1+1)!\,(J_2+1)!}$$

$$\prod_{i=1}^{2} (N_{n_i \ell_i}\; N_{N_i L_i}) \sum_{i\,j} (-1)^m$$

$$\frac{\sqrt{(2\,j)!\,(2\,k)!\,(2\,\ell)!\,(2\,m)!}}{\sqrt{(J_1 - 2\,i + 1)!\,(J_1 - 2\lambda - 2\,i)!\,i!\,j!\,k!\,\ell!\,m!\,n!}} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}$$

$$C^{i\,j}_{(N_1 N_2,\; n_1 n_2)}\, (\sin\varphi)^{L_1 + \ell_1 - 2\,j}\, (\cos\varphi)^{L_2 - \ell_1 + 2\,(i+j)}\,. \qquad (5.\,19)$$

Ici i et j sont restreints par les limitations habituelles du moment angulaire et par les factorielles apparaissant au dénominateur. Pour calculer les coefficients de Talmi et Moshinsky à partir de l'expression formelle (5. 19) il faut connaître les coefficients $C^{ij}_{(N_1 N_2,\; n_1 n_2)}$.

Le calcul de ces coefficients intermédiaires peut se faire de plusieurs manières. Ici nous en exposerons une qui nous paraît particulièrement intéressante.

Nous remarquons qu'en posant

$$S_1 = \frac{\xi_1}{\eta_1}, \quad S_2 = \frac{\xi_2}{\eta_2}, \quad s_1 = -\frac{\overline{\xi'_1}}{\overline{\eta'_1}}, \quad s_2 = \frac{\overline{\xi'_2}}{\overline{\eta'_2}},$$

la quantité dans l'accolade $\{2\}$ de l'expression (5. 18) s'écrit :

$$\{2\} = (-1)^n \frac{\left[[\xi^1\xi^2]^i (\xi^2\overline{\xi'^2})^j (\xi^1\overline{\xi'^2})^k (\xi^2\overline{\xi'^1})^\ell (\xi^1\overline{\xi'^1})^m [\overline{\xi'^2\xi'^1}]^n\right]}{\eta_1^{\,i+k+m}\ \eta_2^{\,i+j+\ell}\ \overline{\eta'_1}^{\,\ell+m+n}\ \overline{\eta'_2}^{\,j+k+n}} \cdot \quad (5.20)$$

Si $\Phi_{t_1t_2(t\mu)}(\xi^1\xi^2)$ désigne la base de la représentation couplée dans l'espace de Bargmann [voir Bargmann (1962)], la quantité entre crochets dans l'expression (5. 20), que nous noterons [ ], s'écrit :

$$[\quad] = \sum_{\substack{t_1t_2t'_1t'_2\\ t\mu\, t'\mu'}} \langle t_1t_2t\mu ; t'_1t'_2t'\mu' | [\quad] \rangle\, \Phi_{t_1t_2(t\mu)}(\xi^1\xi^2)\, \overline{\Phi_{t'_1t'_2(t'\mu')}(\xi'^1\xi'^2)},$$

avec

$$\langle t_1t_2t\mu ; t'_1t'_2t'\mu' | [\quad] \rangle = \int \overline{\Phi_{t_1t_2(t\mu)}(\xi^1\xi^2)}\, \Phi_{t'_1t'_2(t'\mu')}(\xi'^1\xi'^2)\, [\quad] \prod_{i=1}^{2} [d\mu(\xi^i)\ d\mu(\xi'^i)].$$

Le calcul de l'intégrale dans l'expression ci-dessus peut être mené à bien à l'aide de l'expression (5. 15). Ceci conduit à :

$$\langle t_1t_2t\mu ; t'_1t'_2t'\mu' | [\quad] \rangle = \sum_{tt_3} (-1)^{\tau - 2t_3} \sqrt{\frac{(T_1+1)!(T_2+1)!\, j!\, k!\, \ell!\, m!}{(T_1-i+1)!\,(T_1-2t-i)!}}$$

$$\sqrt{\prod_{\alpha=1}^{2}[(T_1-2t_\alpha)!(T_2-2t'_\alpha)!(T_1-2t)!(T_2-2t)!} \begin{pmatrix} j'_1 & j'_2 & j'_3 \\ m'_1 & m'_2 & m'_3 \end{pmatrix}$$

$$\Phi_{t_1t_2(t\mu)}(\xi^1\xi^2)\ \overline{\Phi_{t'_1t'_2(t\mu)}(\xi'^1\xi'^2)}\ , \qquad (5.21)$$

avec

$$T_1 = t_1 + t_2 + t_3\,, \qquad T_2 = t'_1 + t'_2 + t'_3\,, \qquad t_3 = t'_3 = t\,,$$

$$t_1 = \frac{\ell_1 + \Delta}{2}, \quad t_2 = \frac{\ell_2 - \Delta}{2}, \quad t'_1 = \frac{L_1 + \Delta}{2}, \quad t'_2 = \frac{L_2 - \Delta}{2}\,,$$

$$\Delta = \frac{L_1 - L_2 + \ell_2 - \ell_1}{2},$$

$$j'_3 = t\,, \quad j'_2 = \frac{\ell_1 - i}{2}\,, \quad j'_1 = \frac{\ell_2 - i}{2}, \quad m'_3 = \frac{\ell_1 - \ell_2}{2}, \quad m'_1 = j'_1 - j\,,$$

$$m'_2 = j - j'_2\,, \qquad T = j'_1 + j'_2 + j'_3\,.$$

Dans l'expression (5. 21) nous développons $\Phi_{t_1 t_2 (t\,u)}(\xi^1 \xi^2)$ et $\overline{\Phi_{t'_1\, t'_2\, (t\,u)}(\xi'^1 \xi'^2)}$ sur les bases $\Phi_{t_1 u_1}(\xi^1)\ \Phi_{t_2 \mu_2}(\xi^2)$ et $\overline{\Phi_{t'_1 u'_1}(\xi'^1)}\ \overline{\Phi_{t'_2 \mu'_2}(\xi'^2)}$ [voir Bargmann (1962)], puis nous utilisons l'expression (5. 5) et nous obtenons alors les coefficients $C^{i\,j}_{(N_1 N_2,\ n_1 n_2)}$. Il suffit alors de reporter l'expression de ces coefficients dans (5. 19) pour obtenir les coefficients de Talmi et Moshinsky sous la forme finale :

$$< N_1(\vec{R}_1)\, N_2(\vec{R}_2)\,;\, \lambda\, u \,|\, n_1(\vec{r}_1)\, n_2(\vec{r}_2)\,;\, \lambda\, u > = \frac{(-1)^{J_2}}{(4\pi)^2\ 2^{2\sigma}}$$

$$\sqrt{[\ell_1][\ell_2][L_1][L_2]\,(J_1 - 2\lambda)!(J_2 - 2\lambda)!(J_1 + 1)!(J_2 + 1)!}$$

$$N_{n_1\ell_1}\ N_{n_2\ell_2}\ N_{N_1 L_1}\ N_{N_2 L_2}$$

$$\sum_t (2t + 1)(-1)^{T - 2t} \sqrt{(T_1 + 1)!(T_2 + 1)! \prod_{i=1}^{3} (T_1 - 2t_i)!(T_2 - 2\,t'_i)\,!}$$

$$\Big[\sum_{i\,j} (-1)^m\ \frac{1}{i\,!\,j\,!}$$

$$\sqrt{\frac{(2j)!\,(2k)!\,(2\ell)!\,(2m)!\,[j!\,k!\,\ell!\,m!]^{-1}}{(J_1-2i+1)!\,(J_1-2\lambda-2i)!\,(T_1-i+1)!\,(T_2-2\lambda-i)!}}$$

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} j'_1 & j'_2 & t \\ m'_1 & m'_2 & m'_3 \end{pmatrix}$$

$$(\sin\varphi)^{L_1+\ell_1-2j}\,(\cos\varphi)^{L_2-\ell_1+2(i+j)}\Big]$$

$$\Big[\sum_{\substack{\mu_1\mu'_1\\ \mu_2\mu'_2}} \begin{pmatrix} t_1 & t_2 & t \\ \mu_1 & \mu_2 & \mu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t'_1 & t'_2 & t \\ \mu'_1 & \mu'_2 & \mu \end{pmatrix}$$

$$\frac{P^{(n'_1\,,\,n'_2)}_{(N'_1\,,\,N'_2)}(\varphi)}{\sqrt{\prod_{i=1}^{2}[(t_i+\mu_i)!\,(t_i-\mu_i)!\,(t'_i+\mu'_i)!\,(t'_i-\mu'_i)!]}}\Bigg] . \qquad (5.22)$$

avec

$$\ell_1+\mu_1+n'_1 = n_1 ,$$

$$\ell_2+\mu'_2+N'_1 = n_2 ,$$

$$L_1+\mu'_1+N'_1 = N_1 ,$$

$$L_2+\mu'_2+N'_2 = N_2 ,$$

$$\mu = -(\mu_1+\mu_2) = -(\mu'_1+\mu'_2) .$$

5.3 Cas particulier traité par Efros

Pour comparer nos résultats à ceux obtenus par Efros dans le cas particulier qu'il a traité, à savoir le calcul des coefficients de Talmi et Moshinsky dans les limites imposées par la condition $n_1 = n_2 = 0$, nous devons déterminer les coefficients $C^{i\,j}_{(N_1N_2,\ 00)}$. Pour cela il suffit de poser $s_1 = s_2 = 0$ dans l'expression (5.18).

Nous obtenons ainsi :

$$C^{i\ j}_{(N_1 N_2,\ 00)} = (-1)^{N_2} \frac{N_1 + N_2}{N_1 ! N_2 !} ,$$

où [voir (5.17) et (5.14)]

$$i = N_1 + N_2 , \quad n = 0 , \quad j_1 = L_1 , \quad j_2 = L_2 , \quad j_3 = \lambda .$$

Pour suivre la notation de Efros, nous remplaçons j, k, ℓ, m par :

$$j = \frac{1}{2} (\ell'_1 + L_1 - t),$$
$$k = \frac{1}{2} (\ell'_1 - L_1 + t),$$
$$\ell = \frac{1}{2} (\ell'_2 - L_2 + t),$$
$$m = \frac{1}{2} (\ell'_2 + L_2 - t),$$

avec

$$\ell'_1 = \ell_1 - N_1 - N_2 , \qquad \ell'_2 = \ell_2 - N_1 - N_2 .$$

En utilisant :

$$\Gamma (n + \tfrac{3}{2}) = \sqrt{\pi} \frac{(2 n + 1) !!}{2^{n+1}} ,$$

où n est entier, nous obtenons l'expression suivante des coefficients de Talmi et Moshinsky :

$$\langle 0 \ell_1(\vec{r}_1)\, 0\ell_2(\vec{r}_2) ; \lambda \mu | N_1(\vec{R}_1)\, N_2(\vec{R}_2) ; \lambda\mu \rangle$$

$$= (-1)^{N_2} (\tan \varphi)^{N_1 + N_2} (\cos \varphi)^{\ell_1 + \ell_2}$$

$$\sqrt{\frac{[L_1][L_2](J_1 - 2\lambda)!(J_1 + 1)!\, 2^{-(2L_1 + 2L_2 + N_1 + N_2)}}{N_1 ! N_2 ! (2\ell_1 - 1)!!(2\ell_2 - 1)!![2(N_1 + L_1) + 1]!![2(N_2 + L_2) + 1]!!}}$$

$$\sum_t (-1)^m \frac{\sqrt{(2j)!(2k)!(2\ell!)(2m)!}}{j!\,k!\,\ell!\,m!} \begin{pmatrix} L_1 & L_2 & \lambda \\ \ell'_1 - t & t - \ell'_2 & \ell_2 - \ell_1 \end{pmatrix} (\tan \varphi)^{2t} . \quad (5.23)$$

en accord avec le résultat de Efros (1973). Remarquons que dans le travail de Efros ces éléments sont notés :

$$< 0\ell_1(\vec{r}_1)\ 0\ell_2(\vec{r}_2)\ ;\ \lambda\mu\ \left|\ N_2(\vec{R}_2)\ N_1(\vec{R}_1)\ ;\ \lambda\mu\ > .\right.$$

6 Relations entre les coefficients de Talmi et Moshinsky

Nous allons établir des relations entre les coefficients de Talmi et Moshinsky à l'aide de la fonction génératrice de la base sphérique (3. 5) utilisée précédemment par Kumar (1966) et Wong (1970). Ces relations sont particulièrement utiles pour vérifier les calculs numériques qui conduisent aux coefficients de Talmi et Moshinsky.

Nous multiplions l'expression (2. 2) de la base de la représentation couplée par $K(\ell_1, \ell_2, n_1, n_2)\, z_1^{2n_1+\ell_1}\, z_2^{2n_2+\ell_2}$ où

$$K(\ell_1, \ell_2, n_1, n_2) = \frac{N_{n_1\ell_1} N_{n_2\ell_2} (-1)^{n_1+n_2+\ell_1+\ell_2}}{n_1!\ n_2!} \left[\frac{(2\ell_1+1)(2\ell_2+1)}{4\pi}\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$\begin{pmatrix} \ell_1 & \ell_2 & \lambda \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} ,$$

puis nous utilisons l'intégrale de Gaunt de 3 harmoniques sphériques [voir Edmonds (1957)]. En faisant la sommation par rapport à n_1, ℓ_1, m_1, n_2, ℓ_2, m_2 nous obtenons alors :

$$\sum_{\substack{n_1\ell_1\\ n_2\ell_2}} K(\ell_1, \ell_2, n_1, n_2)\, z_1^{2n_1+\ell_1}\, z_2^{2n_2+\ell_2} \left| n_1(\vec{r}_1)\, n_2(\vec{r}_2)\ ;\ \lambda\mu > \right.$$

$$= \left(\frac{1}{\pi}\right)^{\frac{3}{2}} \iint \mathcal{Y}_{\lambda\mu}(\vartheta'\varphi') \exp\left[-z_1^2 - z_2^2 + 2\vec{z}_1\cdot\vec{r}_1 + 2\vec{z}_2\cdot\vec{r}_2 - \frac{1}{2}(\vec{r}_1^{\,2} + \vec{r}_2^{\,2})\right]$$

$$\sin\vartheta'\ d\vartheta'\ d\varphi' , \tag{6. 1}$$

avec $\vec{z}_1 = z_1 \vec{i}$ et $\vec{z}_2 = z_2 \vec{i}$ où $\vec{i}$ est un vecteur unitaire du type $\vec{i} = \vec{i}(\theta, \varphi)$. Nous reconduisons les mêmes calculs pour la deuxième fonction d'onde $|N_1(\vec{R}_1)\; N_2(\vec{R}_2) ; \lambda\mu>$. A partir du résultat ainsi obtenu et de l'expression (6.1) nous déduisons :

$$\sum_{\substack{n_1 \ell_1 n_2 \ell_2 \\ N_1 L_1 N_2 L_2}} K(L_1, L_2, N_1, N_2)\, K(\ell_1, \ell_2, n_1, n_2)\, z_1'^{\,2n_1+\ell_1}\, z_2'^{\,2n_2+\ell_2}$$

$$z_1^{2N_1+L_1}\, z_2^{2N_2+L_2} < N_1(\vec{R}_1)\, N_2(\vec{R}_2) ; \lambda\mu \,|\, n_1(\vec{r}_1)\, n_2(\vec{r}_2) ; \lambda\mu >$$

$$= \frac{1}{\pi^3} \int \overline{\mathcal{Y}_{\lambda\mu}(\theta,\varphi)}\, \mathcal{Y}_{\ell m}(\theta', \varphi') \;\exp\left[\, Q(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{R}_1, \vec{R}_2)\,\right] \; d\vec{R}_1 \; d\vec{R}_2, \tag{6.2}$$

avec

$$Q(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{R}_1, \vec{R}_2) = -\left(z_1^2 + z_2^2 + z_1'^2 + z_2'^2\right) + 2\left(\vec{z}_1 . \vec{r}_1 + \vec{z}_2 . \vec{r}_2 + \vec{z}_1' . \vec{R}_1 + \vec{z}_2' . \vec{R}_2\right)$$

$$- \frac{1}{2}\left(\vec{r}_1^{\,2} + \vec{r}_2^{\,2} + \vec{R}_1^{\,2} + \vec{R}_2^{\,2}\right) ,$$

où

$$\vec{z}_1 = z_1 \vec{i} , \quad \vec{z}_2 = z_2 \vec{i} \quad \vec{z}_1' = z_1' \vec{j}, \quad \vec{z}_2' = z_2' \vec{j},$$

$$\vec{i} = \vec{i}(\theta, \varphi) \quad , \quad \vec{j} = \vec{j}(\theta', \varphi').$$

En remplaçant $\vec{r}_1$ et $\vec{r}_2$ par leur expression (2.3) en fonction de $\vec{R}_1$ et $\vec{R}_2$, puis en effectuant l'intégration dans l'expression (6.2), nous obtenons une relation nouvelle entre les coefficients de Talmi et Moshinsky, à savoir :

$$\sum_{\substack{n_1 \ell_1 n_2 \ell_2 \\ N_1 L_1 N_2 L_2}} K(L_1, L_2, N_1, N_2)\, K(\ell_1, \ell_2, n_1, n_2)$$

$$< N_1(\vec{R}_1)\, N_2(\vec{R}_2) ; \lambda\mu \,|\, n_1(\vec{r}_1)\; n_2(\vec{r}_2) ; \lambda\mu >$$

$$= \frac{2\pi^{\frac{3}{2}}(-1)^{2N_2+L_2}(2n'+\lambda)!}{\Gamma(n'+1)\,\Gamma(n'+\lambda+\frac{3}{2})\sqrt{(2N_1+L_1)!\,(2N_2+L_2)!(2n_1+\ell_1)!(2n_2+\ell_2)}}$$

$$d^J_{(M,\ M')}(2\varphi)\ , \qquad (6.3)$$

avec

$$n' = (N_1 + N_2) + \frac{L_1 + L_2 - \lambda}{2}\ , \qquad M' = -(N_1 - N_2) - \frac{L_1 - L_2}{2},$$

$$M = -(n_1 - n_2) - \frac{\ell_1 - \ell_2}{2}\ , \qquad J = (N_1 + N_2) + \frac{L_1 + L_2}{2}\ .$$

Enfin $d^J_{(M,\ M')}(2\varphi)$ est l'élément de la matrice de rotation [voir Edmonds (1957)]. La sommation sur n_1, ℓ_1, n_2, ℓ_2, N_1, L_1, N_2, L_2 est limitée par

$2n_1 + \ell_1 = x$, $\qquad 2n_2 + \ell_2 = y$,

$2N_1 + L_1 = z$, $\qquad 2N_2 + L_2 = t$,

où

x, y, z, t sont des nombres entiers positifs.

7. Conclusion

Nous avons construit une nouvelle fonction génératrice de la base sphérique de l'oscillateur harmonique à partir de la fonction génératrice des polynômes de Laguerre et des harmoniques sphériques.
Elle présente un grand intérêt car non seulement elle permet le calcul des éléments de passage de la base sphérique à la base cartésienne isotrope ou anisotrope de l'oscillateur harmonique mais surtout elle offre un avantage que ne possède par la fonction génératrice utilisée par Kumar (1966) et par Wong (1970). Elle permet en effet de faire usage des résultats de Bargmann (1962) et de Schwinger (1965) sur le groupe des rotations pour le calcul des coefficients de Talmi et des coefficients de Talmi et Moshinsky qui sont très utiles en physique nucléaire.

Dans l'expression que nous avons obtenue de ces coefficients ne figurent que les symboles 3-jm. De plus à partir de notre expression générale des coefficients de Talmi et Moshinsky nous avons pu retrouver le résultat particulier obtenu par Efros (1973).

Dans ce travail nous avons également obtenu une nouvelle relation entre les coefficients de Talmi et Moshinsky qui se révèle utile pour effectuer la vérification des calculs pratiques de ces coefficients.

Pour finir, signalons que notre fonction génératrice de la base sphérique pourrait être intéressante pour la détermination des éléments de matrice de certains types de potentiel (potentiel Gaussien, par exemple). Enfin, notons que notre approche pourrait aussi être utilisée dans d'autres domaines de la physique (physique atomique et moléculaire, par exemple) : il est possible en effet d'adopter une autre base que la base sphérique de l'oscillateur harmonique et de construire par notre procédé la fonction génératrice de cette nouvelle base.

Références

Baranger M et Davies K T R 1966 Nucl. Phys. 49 403

Bargmann V 1962 Rev. Mod. Phys. 34 319

Dobeš J 1977 J. Phys. A Math. Gén. 10 2053

Edmonds A R 1957 Angular momentum in quantum mechanics (Princeton, N J : Princeton university press)

Efros V D 1973 Nucl. Phys. A 202 180

Hage Hassan M 1979 Thèse d'Etat Lyon

Kumar K 1966 J. Math. Phys. 7 671

Meniah A 1965 Mécanique Quantique I (Paris : Dunod)

Moshinsky M 1959 Nucl. Phys. 13 104

Racah G 1942 Phys. Rev. 61 136

Raynal J 1976 Nucl. Phys. A 259 272

Schwinger J 1965 Quantum Theory of Angular Momentum Ed. Biedenharn et van Dam (New-York : Academic)

Smirnov Y F 1962 Nucl. Phys. 39 346

Talmi I 1952 Helv. Phys. Acta 25 185

Wong C W 1970 Nucl. Phys. A 147 563