Coefficients of Talmi and of Moshinsky and Smirnov for the harmonic oscillator basis

1980 J. Phys. A: Math. Gen. 13 1903

(http://iopscience.iop.org/0305-4470/13/6/014)

J. Phys. A: Math. Gen. **13** (1980) 1903–1924. Printed in Great Britain

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

M Hage Hassan‡

Institut de Physique Nucléaire (et IN2 P3), Université Claude Bernard Lyon-1, 43, Bd du 11 Novembre 1918, 69622 Villeurbanne, France

Received 21 February 1979, in final form 7 August 1979

Résumé. Adoptant les méthodes de travail et les résultats de Schwinger et Bargmann sur le groupe des rotations, nous construisons des fonctions génératrices des coefficients de Talmi et des coefficients de Moshinsky et Smirnov et nous calculons de nouvelles expressions de ces coefficients particulièrement utiles et se prêtant bien aux calculs numériques. L'expression des coefficients de Talmi dans le cas où deux nombres quantiques principaux sont nuls et où un nombre quantique magnétique est minimal est particulièrement simple et permet, à l'aide de formules de récurrence, le calcul des autres coefficients. Les expressions des coefficients de Talmi et de Moshinsky et Smirnov que nous donnons conduisent aisément aux calculs de ces coefficients dans des cas particuliers. De nouvelles relations entre les coefficients de Moshinsky et Smirnov, utiles du point de vue pratique, sont établies.

Abstract. Following the works of Schwinger and Bargmann on the three-dimensional rotation-group, we construct new generating functions for the Talmi coefficients and the Moshinsky–Smirnov coefficients. Such a construction is achieved by manipulating a new generating function for the harmonic oscillator spherical basis. The latter generating function is constructed in turn from the well-known generating functions for the Laguerre polynomials and the spherical harmonics. The material is used to get new expressions for the Talmi and Moshinsky–Smirnov coefficients, which are particularly appropriate to hand and machine calculations. In the particular case where two of the principal quantum numbers are null and one of the magnetic quantum numbers is minimal, our expression for the Talmi coefficients reduces to a simple formula which turns out to be very easy to handle. The combination of this formula with recurrence relations for Talmi coefficients provides us with an alternative way of calculating Talmi coefficients. Furthermore, our expression for the Moshinsky–Smirnov coefficients yields the Efros formula as a particular case. We also mention how other particular relations both for the Talmi and the Moshinsky–Smirnov coefficients can be obtained from our general expressions. Finally, new expressions, which are useful from a practical point of view, between Moshinsky–Smirnov coefficients are established.

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 recontre dans de nombreux domaines de la physique. En particulier, elle est utile dans la théorie cinétique des gaz (Kumar 1967), en physique nucléaire (voir par

† Ce travail constitue la troisième partie d'une thèse de Doctorat d'Etat en cours de rédaction.
‡ Adresse actuelle: Université Libanaise, Faculté de Pédagogie, Beyrouth (Liban).

exemple Wong (1970)) et en physique moléculaire (Fieck 1979). De façon générale, elle est fondamentale pour calculer les éléments de la matrice du potentiel à deux corps dans la représentation sphérique de l'oscillateur harmonique. Une expression simple des éléments de la matrice de transformation (coefficients de Talmi et coefficients de Moshinsky et Smirnov) se prêtant à des calculs numériques aisés présente donc un grand intérêt.

Diverses méthodes (Talmi 1952, Moshinsky 1959, Kumar 1966a, Gal 1968, Trlifaj 1972 et Raynal 1976) ont conduit leurs auteurs à des expressions des éléments de la matrice de transformation. Certains auteurs (Baranger et Davies 1966, Efros 1973, Dobeš 1977, Fieck 1979) utilisant l'une ou l'autre des méthodes précédentes ont proposé de nouvelles expressions des éléments de la matrice de transformation. Parmi ces travaux nous en distinguerons deux: le travail de Efros (1973) et celui de Kumar (1966a). Efros (1973) a utilisé la méthode proposée par Moshinsky ainsi qu'une propriété des symboles 9-j (voir Yutsis et Bandzaitis (1965)) pour obtenir, dans le cas où deux nombres quantiques principaux sont nuls, une expression des coefficients qui est à notre connaissance la plus simple de la littérature. Kumar (1966a) a utilisé une fonction génératrice de la base sphérique de l'oscillateur harmonique et a obtenu une fonction génératrice des coefficients de Talmi ainsi qu'une expression de ces coefficients à la fois simple et remarquable par sa symétrie. Mais pour le calcul des coefficients de Talmi, Kumar (1966a) a développé sa fonction génératrice sur la base de la représentation couplée de quatre moments angulaires ce qui rend inévitable l'introduction dans l'expression de ces coefficients des symboles 9-j dont le calcul s'avère long.

Le grand intérêt qu'ont suscité, notamment sur le plan théorique, mais aussi sur le plan pratique, les travaux de Schwinger (1965) et de Bargmann (1962) sur le groupe des rotations nous a incité à utiliser leurs résultats et à étendre leurs méthodes au calcul des coefficients de Talmi et des coefficients de Moshinsky et Smirnov. Dans les travaux de Schwinger et de Bargmann les fonctions génératrices utilisées sont choisies de telle sorte que leur développement fasse intervenir exclusivement des monômes complexes dont la puissance est exprimée par des paramètres qui sont fonction de nombres quantiques de la base de la représentation employée; ce qui fait que dans le calcul des éléments de passage d'une base de représentation à une autre, il suffit de connaître ces paramètres pour obtenir les éléments de passage. Dans notre travail nous proposons une fonction génératrice de la base sphérique dont le choix est fait comme le font Bargmann et Schwinger et, en n'utilisant que des opérations mathématiques élémentaires, nous obtenons une fonction génératrice des coefficients de Talmi. Par la même méthode en utilisant en outre des résultats des travaux de Bargmann et Schwinger sur le groupe des rotations nous obtenons une fonction génératrice des coefficients de Moshinsky et Smirnov.

Dans cette étude nous consacrons la seconde partie à la définition des coefficients de Talmi et des coefficients de Moshinsky et Smirnov. Dans la troisième partie nous construisons la nouvelle fonction génératrice de la base sphérique de l'oscillateur harmonique (cf la relation (3.4)). La quatrième partie présente la nouvelle fonction génératrice des coefficients de Talmi (cf la relation (4.3)). Nous déduisons de cette fonction génératrice une nouvelle expression des coefficients de Talmi (cf la relation (4.15)). De plus, nous obtenons une nouvelle expression de ces coefficients dans un cas particulier (cf la relation (4.19)). Finalement, à l'aide de cette dernière expression et à partir d'une nouvelle formule de récurrence (cf la relation (4.21)) nous proposons une nouvelle méthode pour calculer les coefficients de Talmi. Dans la cinquième partie nous donnons la nouvelle fonction génératrice des coefficients de Moshinsky et Smirnov (cf la relation (5.6)). Nous déduisons de cette fonction génératrice une nouvelle expression des coefficients de Moshinsky et Smirnov (cf la relation (5.11)). Cette expression permet alors de retrouver la formule obtenue dans le cas particulier traité par Efros (1973). Enfin, la sixième partie est consacrée à une nouvelle relation entre les coefficients de Moshinsky et Smirnov (cf la relation (6.3)). Dans l'appendice 1 nous donnons quelques propriétés de la fonction Z définie à partir du travail de Kumar (1966b) et utile pour le calcul des coefficients de Talmi et de Moshinsky et Smirnov. Dans l'appendice 2 nous remarquons que notre fonction génératrice des coefficients de Moshinsky et Smirnov se développe de différentes manières et nous exploitons ceci pour dériver une nouvelle expression de ces coefficients (cf la relation (A2.3)) qui parallèle celle de Dobeš (1977).

2. Préliminaires

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

$$|nlm(\boldsymbol{r})\rangle = N_{nl}(1/\pi)^{3/4}\exp(-\tfrac{1}{2}\boldsymbol{r}^2)L_n^{(l+1/2)}(\boldsymbol{r}^2)y_{lm}(\boldsymbol{r}), \tag{2.1}$$

où $\boldsymbol{r}=(x, y, z)$, $L_n^{(l+1/2)}(\boldsymbol{r}^2)$ est un polynôme de Laguerre (voir Messiah (1965)), $y_{lm}(\boldsymbol{r})$ est une harmonique sphérique et

$$N_{nl}=\left(\frac{2\pi^{3/2}\Gamma(n+1)}{\Gamma(n+l+3/2)}\right)^{1/2}.$$

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

$$|n_1l_1(\boldsymbol{r}_1)n_2l_2(\boldsymbol{r}_2);\lambda\mu\rangle=\sum_{m_1m_2}\langle l_1l_2m_1m_2|\lambda\mu\rangle|n_1l_1m_1(\boldsymbol{r}_1)\rangle|n_2l_2m_2(\boldsymbol{r}_2)\rangle, \tag{2.2}$$

où $\langle l_1l_2m_1m_2|\lambda\mu\rangle$ désigne un coefficient de Clebsch et Gordan. Pour simplifier nous utiliserons les abréviations:

$$|n(\boldsymbol{r})\rangle = |nlm(\boldsymbol{r})\rangle,$$

$$|n_1(\boldsymbol{r}_1)n_2(\boldsymbol{r}_2);\lambda\mu\rangle = |n_1l_1(\boldsymbol{r}_1)n_2l_2(\boldsymbol{r}_2);\lambda\mu\rangle,$$

$$|n_1(\boldsymbol{r}_1)n_2(\boldsymbol{r}_2)\rangle = |n_1(\boldsymbol{r}_1)\rangle|n_2(\boldsymbol{r}_2)\rangle.$$

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

$$\boldsymbol{r}_1=\cos\phi\boldsymbol{R}_1+\sin\phi\boldsymbol{R}_2, \qquad \boldsymbol{r}_2=\sin\phi\boldsymbol{R}_1-\cos\phi\boldsymbol{R}_2. \tag{2.3}$$

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

$$2(n_1+n_2)+l_1+l_2=2(N_1+N_2)+L_1+L_2, \tag{2.4}$$

$$(-1)^{l_1+l_2}=(-1)^{L_1+L_2},$$

$$\boldsymbol{L}_1+\boldsymbol{L}_2=\boldsymbol{l}_1+\boldsymbol{l}_2. \tag{2.5}$$

Dans la base de la représentation couplée de deux particules le passage de la représentation $\{\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2\}$ à la représentation $\{\boldsymbol{R}_1, \boldsymbol{R}_2\}$ se fait à l'aide des coefficients de Moshinsky et Smirnov qui s'écrivent $\langle n_1(\boldsymbol{r}_1)n_2(\boldsymbol{r}_2);\lambda|N_1(\boldsymbol{R}_1)N_2(\boldsymbol{R}_2);\lambda\rangle$. Les coefficients de Talmi

$\langle n_1(\boldsymbol{r}_1)n_2(\boldsymbol{r}_2)|N_1(\boldsymbol{R}_1)N_2(\boldsymbol{R}_2)\rangle$ sont liés aux coefficients de Moshinsky et Smirnov par la transformation:

$$\begin{aligned}\langle n_1(\boldsymbol{r}_1)n_2(\boldsymbol{r}_2)|N_1(\boldsymbol{R}_1)N_2(\boldsymbol{R}_2)\rangle \\ &= \sum_{\lambda} \langle\lambda\mu|l_1l_2m_1m_2\rangle\langle\lambda\mu|L_1L_2M_1M_2\rangle \\ &\quad\times\langle n_1(\boldsymbol{r}_1)n_2(\boldsymbol{r}_2);\lambda|N_1(\boldsymbol{R}_1)N_2(\boldsymbol{R}_2);\lambda\rangle.\end{aligned} \tag{2.6}$$

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:

$$\left(\frac{4\pi}{2l+1}\right)^{1/2}\sum_{m=-l}^{+l}\frac{\xi^{l+m}\eta^{l-m}}{[(l+m)!(l-m)!]^{1/2}}y_{lm}(\boldsymbol{r})=\frac{(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{r})^l}{2^l l!}, \tag{3.1}$$

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

$$b_x=-\xi^2+\eta^2, \qquad b_y=-\mathrm{i}(\xi^2+\eta^2), \qquad b_z=2\xi\eta.$$

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

$$\Phi_{lm}(\xi^0)=\frac{\xi^{l+m}\eta^{l-m}}{[(l+m)!(l-m)!]^{1/2}}, \tag{3.2}$$

où $\xi^0=(\xi,\eta)$ et $\Phi_{lm}(\xi^0)$ représente une base dans l'espace de Bargmann avec la mesure

$$\mathrm{d}\mu(\xi^0)=\frac{\mathrm{e}^{-(\xi\bar{\xi}+\eta\bar{\eta})}}{\pi^2}\,\mathrm{d}\xi\,\mathrm{d}\eta,$$

où

$$\xi=x+\mathrm{i}y, \qquad \eta=x'+\mathrm{i}y',$$

avec

$$\mathrm{d}\xi=\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y, \qquad \mathrm{d}\eta=\mathrm{d}x'\,\mathrm{d}y'.$$

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

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

La fonction génératrice de la base sphérique $G(z,\xi^0,r)$ s'obtient en multipliant (2.1) par

$$\left(\frac{4\pi}{2l+1}\right)^{1/2}\frac{z^n}{N_{nl}}\Phi_{lm}(\xi^0),$$

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:

$$G(z,\xi^0,r)=\sum_{nlm}\left(\frac{4\pi}{2l+1}\right)^{1/2}\frac{z^n}{N_{nl}}\Phi_{lm}(\xi^0)|n(\boldsymbol{r})\rangle$$

$$=\left(\frac{1}{\pi}\right)^{3/4}\sum_l\left[\sum_n z^n L_n^{(l+1/2)}(\boldsymbol{r}^2)\right]$$

$$\times\left[\sum_{m=-l}^{+l}\left(\frac{4\pi}{2l+1}\right)^{1/2}\Phi_{lm}(\xi^0)y_{lm}(\boldsymbol{r})\right]\exp(-\boldsymbol{r}^2/2)$$

$$=\left(\frac{1}{\pi}\right)^{3/4}\sum_l\frac{\exp[-(\boldsymbol{r}^2z)/(1-z)]}{(1-z)^{l+3/2}}\frac{(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{r})^l}{2^l l!}\exp(-\boldsymbol{r}^2/2)$$

$$=\left(\frac{1}{\pi}\right)^{3/4}\exp\left[-\frac{\boldsymbol{r}^2}{2}\left(\frac{1+z}{1-z}\right)+\frac{\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{r}}{2(1-z)}\right](1-z)^{-3/2}. \tag{3.4}$$

Il faut noter que l'utilisation de notre fonction génératrice $G(z,\xi^0,r)$ et de la fonction génératrice utilisée par Kumar (1966a), à savoir:

$$G(\boldsymbol{a},\boldsymbol{r})=(1/\pi)^{3/4}\exp(-\boldsymbol{a}^2+2\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{r}-\tfrac{1}{2}\boldsymbol{r}^2)$$

$$=\sum_{nlm}N_{nl}\frac{(-1)^n}{n!}\boldsymbol{a}^{2n}y_{lm}(\boldsymbol{a})|n(\boldsymbol{r})\rangle, \tag{3.5}$$

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 (1980)).

4. Coefficients de Talmi

4.1. Expression générale des coefficients de Talmi

En utilisant la fonction génératrice de la base sphérique (3.4) nous pouvons obtenir la fonction génératrice $G(s,\bar{S},\xi,\bar{\xi}')$ des coefficients de Talmi. Pour cela nous remplaçons

$$|n_1(\boldsymbol{r}_1)\rangle,\qquad |n_2(\boldsymbol{r}_2)\rangle,\qquad |N_1(\boldsymbol{R}_1)\rangle\qquad\text{et}\qquad |N_2(\boldsymbol{R}_2)\rangle$$

dans l'expression (2.6) respectivement par leur fonction génératrice

$$G(s_1,\xi^1,r_1),\qquad G(s_2,\xi^2,r_2),\qquad G(\bar{S}_1,\overline{\xi'^1},R_1)\qquad\text{et}\qquad G(\bar{S}_2,\overline{\xi'^2},R_2).$$

Nous avons:

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

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

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

$$\left.-\frac{\boldsymbol{R}_1^2}{2}\frac{1+\bar{S}_1}{1-\bar{S}_1}+\frac{\bar{\boldsymbol{A}}_1\cdot\boldsymbol{R}_1}{2(1-\bar{S}_1)}-\frac{\boldsymbol{R}_2^2}{2}\frac{1+\bar{S}_2}{1-\bar{S}_2}+\frac{\bar{\boldsymbol{A}}_2\cdot\boldsymbol{R}_2}{2(1-\bar{S}_2)}\right)\mathrm{d}^3\boldsymbol{R}_1\,\mathrm{d}^3\boldsymbol{R}_2, \tag{4.1}$$

soit encore,

$$G(s,\bar S,\xi,\overline{\xi'})=\sum_{\substack{n_1n_2l_1l_2\\N_1N_2L_1L_2\\m_1m_2M_1M_2}}\frac{(4\pi)^2}{[\Pi_{i=1}^2(2L_i+1)(2l_i+1)]^{1/2}}\prod_{i=1}^{2}\frac{s_i^{n_i}\bar S_i^{N_i}}{N_{N_iL_i}N_{n_il_i}}\Phi_{l_im_i}(\xi^i)$$
$$\times\Phi_{L_iM_i}(\overline{\xi'^i})\langle n_1(\boldsymbol r_1)n_2(\boldsymbol r_2)|N_1(\boldsymbol R_1)N_2(\boldsymbol R_2)\rangle, \tag{4.2}$$

où $\boldsymbol a_1$, $\boldsymbol a_2$, $\boldsymbol A_1$ et $\boldsymbol A_2$ 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 (4.1), nous obtenons:

$$G(s,\bar S,\xi,\overline{\xi'})=\exp\left(\frac{Q(s,\bar S,\xi,\overline{\xi'})}{8P(s,\bar S)}\right)\Big/[P(s,\bar S)]^{3/2}, \tag{4.3}$$

avec

$$P(s,\bar S)=1-\sin^2\phi(s_1\bar S_2+s_2\bar S_1)-\cos^2\phi(s_2\bar S_2+s_1\bar S_1)+s_1s_2\bar S_1\bar S_2,$$

et

$$Q(s,\bar S,\xi,\overline{\xi'})=\boldsymbol a_1\cdot\boldsymbol a_2(\bar S_2-\bar S_1)\sin\phi\cos\phi+\boldsymbol a_1\cdot\bar{\boldsymbol A}_1(1-\bar S_2s_2)\cos\phi$$
$$+\boldsymbol a_1\cdot\bar{\boldsymbol A}_2\sin\phi(1-s_2\bar S_1)+\boldsymbol a_2\cdot\bar{\boldsymbol A}_1(1-\bar S_2s_1)\sin\phi$$
$$-\boldsymbol a_2\cdot\bar{\boldsymbol A}_2\cos\phi(1-s_1\bar S_1)+\bar{\boldsymbol A}_1\cdot\bar{\boldsymbol A}_2(s_2-s_1)\sin\phi\cos\phi,$$

où

$$\boldsymbol a_1\cdot\boldsymbol a_2=-2[\xi^1\xi^2]^2,\qquad \boldsymbol a_i\cdot\bar{\boldsymbol A}_j=2(\xi^i\overline{\xi'^j})^2,\qquad i,j=1,2,$$

avec

$$[\xi^i\overline{\xi'^j}]=\xi_i\overline{\eta'_j}-\eta_i\overline{\xi'_j},\qquad (\xi^i\overline{\xi'^j})=\xi_i\overline{\xi'_j}+\eta_i\overline{\eta'_j}.$$

La fonction génératrice des coefficients de Talmi (4.2) présente un grand intérêt pour le calcul des coefficients de Moshinsky et Smirnov que nous exposerons dans le prochain paragraphe. Le calcul des coefficients de Talmi peut être déduit de la relation (2.6) dans laquelle il suffit de reporter l'expression des coefficients de Moshinsky et Smirnov. Mais ici nous allons exposer une autre manière d'obtenir les coefficients de Talmi en partant de leur fonction génératrice (4.3).

Le développement de $G(s,\bar S,\xi,\overline{\xi'})$ s'écrit:

$$G(s,\bar S,\xi,\overline{\xi'})=\sum_{ijklmn}\frac{(-1)^m}{2^{2\sigma}}\frac{\{1\}}{i!j!k!l!m!n!}\frac{\{2\}}{[P(s,\bar S)]^{\sigma+3/2}}$$
$$\times(\sin\phi)^{i+k+l+n}(\cos\phi)^{i+j+m+n}, \tag{4.4}$$

où

$$\{1\}=[\xi^1\xi^2]^{2i}(\xi^1\overline{\xi'^1})^{2j}(\xi^1\overline{\xi'^2})^{2k}(\xi^2\overline{\xi'^1})^{2l}(\xi^2\overline{\xi'^2})^{2m}[\overline{\xi'^1}\,\overline{\xi'^2}]^{2n}, \tag{4.5}$$

$$\begin{aligned}\{2\}&=(\bar S_1-\bar S_2)^i(1-\bar S_2s_2)^j(1-s_2\bar S_1)^k(1-s_1\bar S_2)^l(1-s_1\bar S_1)^m(s_1-s_2)^n,\\ \sigma&=i+j+k+l+m+n.\end{aligned} \tag{4.6}$$

La détermination des coefficients de Moshinsky et Smirnov exige que les indices de sommation dans l'expression (4.4) soient les mêmes que ceux qui interviennent dans l'expression (4.2). Compte-tenu du fait que les modules ξ^1, $\overline{\xi'^1}$, ξ^2 et $\overline{\xi'^2}$ ont respectivement pour exposants $2l_1$, $2L_1$, $2l_2$ et $2L_2$, nous remplaçons dans l'expression (4.4) 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:

$$\begin{aligned}
&i+j+k=l_1, && k=l_1-i-j, && \Delta=(L_2-L_1+l_2-l_1)\tfrac{1}{2}\\
&i+l+m=l_2, && l=L_1-\Delta_1-i-j, && \Delta_1=\tfrac{1}{2}[L_1+L_2-(l_1+l_2)],\\
&j+l+n=L_1, && m=\Delta+j, && \sigma=(l_1+l_2+L_1+L_2)\tfrac{1}{2}.\\
&k+m+n=L_2, && n=\Delta_1+i.
\end{aligned} \tag{4.7}$$

Par la suite nous conserverons la notation i, j, k, l, m, n. Pour écrire le développement des expressions {1} et {2} nous utilisons des coefficients de couplage

$$Z=Z\begin{pmatrix} l_1 & l_2 & L_1 & L_2 & \\ m_1 & m_2 & -M_1 & -M_2 & (i,j)\end{pmatrix}$$

où l_i, L_i, m_i et M_i sont les nombres quantiques orbitaux et magnétiques (voir l'appendice 1). Ces coefficients Z possèdent les propriétés de symétrie des coefficients S que Kumar (1966b) a introduits dans son étude des couplages symétriques du moment angulaire mais ils diffèrent de ces derniers par un facteur de phase (voir l'appendice 1). Ainsi:

$$\{1\}=\left(\frac{(J+1)!}{\omega_1(i,j)}\right)^{1/2}\sum_m Z\begin{pmatrix} l_1 & l_2 & L_1 & L_2 & \\ m_1 & m_2 & -M_1 & -M_2 & (i,j)\end{pmatrix}(-1)^{L_1+L_2+M_1+M_2}$$
$$\times\prod_{i=1}^{2}\Phi_{l_im_i}(\xi^i)\overline{\Phi_{L_iM_i}(\xi'^i)}, \tag{4.8}$$

avec

$$\omega_1(ij)=((2i)!(2j)!(2k)!(2l)!(2m)!(2n)!)^{-1}, \qquad J=l_1+l_2+L_1+L_2.$$

De même:

$$\{2\}=\left(\frac{(T+1)!}{\omega_2(i,j)}\right)^{1/2}(-1)^{T/2-i}\sum_\mu \bar{S}_1^{t_1+\mu_1}\bar{S}_2^{t_2+\mu_2}s_1^{t_3-\mu_3}s_2^{t_4-\mu_4}$$
$$\times Z\begin{pmatrix} t_1 & t_2 & t_3 & t_4 & \\ \mu_1 & \mu_2 & \mu_3 & \mu_4 & (i,j)\end{pmatrix}\left[\prod_{i=1}^{4}(t_i+\mu_i)!(t_i-\mu_i)!\right]^{-1/2}, \tag{4.9}$$

avec

$$\omega_2(i,j)=(i!j!k!l!m!n!)^{-1},$$
$$2t_1=l_1+\Delta, \qquad 2t_2=l_2-\Delta, \qquad 2t_3=L_1+\Delta, \qquad 2t_4=L_2-\Delta,$$
$$T=t_1+t_2+t_3+t_4 \qquad \text{et} \qquad \sum_{i=1}^{4}\mu_i=0.$$

Pour calculer les coefficients Z, nous remarquons que dans le cas où $\mu_4=t_4$ nous pouvons les exprimer en fonction des symboles 3-jm, soit:

$$Z\begin{pmatrix} t_1 & t_2 & t_3 & t_4 & \\ \mu_1 & \mu_2 & \mu_3 & \mu_4 & (i,j)\end{pmatrix}=(-1)^{T/2-i+2t_1'}\left[\frac{(T'+1)!\,\Pi_{i=1}^3(T'-2t_i')!\,\omega_2(i,j)}{(T+1)!}\right]^{1/2}$$
$$\times\left[\frac{\Pi_{i=1}^3(t_i+\mu_i)!(t_i-\mu_i)!(2t_4)!}{\Pi_{i=1}^3(t_i'+\mu_i')!(t_i'-\mu_i')!}\right]^{1/2}\begin{pmatrix} t_1' & t_2' & t_3'\\ \mu_1' & \mu_2' & \mu_3'\end{pmatrix}, \tag{4.10}$$

où

$$t'_1 = t_1 - \tfrac{1}{2}k, \qquad t'_2 = t_2 - \tfrac{1}{2}j, \qquad t'_3 = t_3 - \tfrac{1}{2}n, \qquad T' = t'_1 + t'_2 + t'_3,$$

$$\mu'_1 = -\mu_1 - \tfrac{1}{2}k, \qquad \mu'_2 = -\mu_2 - \tfrac{1}{2}j, \qquad \mu'_3 = -\mu_3 - \tfrac{1}{2}n,$$

et en utilisant la formule de récurrence suivante:

$$\sum_{i=1}^{4} [(t_i + \mu_i)(t_i - \mu_i - 1)]^{1/2} Z\begin{pmatrix} t_1 & \dots & t_i & t_4 & \\ \mu_1 & \dots & \mu_i - 1 & \mu_4 & (i, j) \end{pmatrix} = 0. \tag{4.11}$$

qui est une généralisation de la formule de récurrence des symboles 3-*jm* (Edmonds 1957), nous obtenons tous les coefficients Z. Pour le calcul complet des coefficients de Talmi il est nécessaire de connaître les coefficients du développement de $1/[P(s, \bar{S})]^{\sigma+3/2}$. Nous posons:

$$\frac{1}{[P(s, \bar{S})]^{\sigma+3/2}} = \sum_{\substack{n'_1 n'_2 \\ N'_1 N'_2}} {}^{\sigma}P^{(n'_1, n'_2)}_{(N'_1, N'_2)}(\phi) s_1^{n'_1} s_2^{n'_2} \bar{S}_1^{N'_1} \bar{S}_2^{N'_2}, \tag{4.12}$$

le changement de s_1 en $\bar{S}_1$ et s_2 en $\bar{S}_2$ ne modifie pas l'expression ci-dessus de même que le changement de s_1 en s_2 et $\bar{S}_1$ en $\bar{S}_2$, ainsi:

$${}^{\sigma}P^{(n'_1, n'_2)}_{(N'_1, N'_2)}(\phi) = {}^{\sigma}P^{(N'_1, N'_2)}_{(n'_1, n'_2)}(\phi) = {}^{\sigma}P^{(n'_2, n'_1)}_{(N'_2, N'_1)}(\phi) = {}^{\sigma}P^{(N'_2, N'_1)}_{(n'_2, n'_1)}(\phi).$$

De l'expression (4.12) nous déduisons:

$$\begin{aligned} {}^{\sigma}P^{(n'_1, n'_2)}_{(N'_1, N'_2)}(\phi) &= \sum_m (-1)^m \frac{\Gamma(r + \sigma' - m)}{m!\,\Gamma(r)} \sin \phi^{2(N'_1 - n'_1)} \\ &\quad \times \cos \phi^{2(n'_1 + N'_2) - 4m} \sum_i \frac{\tan \phi^{4i}}{i!\,(N'_1 - n'_1 + i)!\,(N'_2 - m - i)!\,(n'_1 - m - i)!}, \end{aligned} \tag{4.13}$$

où

$$\sigma' = n'_1 + n'_2 = N'_1 + N'_2, \qquad r = \sigma + \tfrac{3}{2}.$$

Dans le cas particulier où $n'_1 = 0$ l'expression précédente s'écrit:

$${}^{\sigma}P^{(0, n'_2)}_{(N'_1, N'_2)} = \frac{\Gamma(\sigma + n'_2 + \frac{3}{2})}{\Gamma(\sigma + \frac{3}{2}) N'_1!\, N'_2!} (\sin \phi)^{2N'_1} (\cos \phi)^{2N'_2}. \tag{4.14}$$

Nous obtenons les coefficients de Talmi en reportant dans l'expression (4.4) le développement des expressions (4.8), (4.9) et (4.12) puis en établissant la comparaison avec l'expression (4.2). Ceci conduit à l'expression finale:

$$\begin{aligned} &\langle n_1(\boldsymbol{r}_1) n_2(\boldsymbol{r}_2) | N_1(\boldsymbol{R}_1) N_2(\boldsymbol{R}_2) \rangle \\ &\quad = \frac{1}{(4\pi)^2} \prod_{i=1}^{2} N_{n_i l_i} N_{N_i L_i} \left[\prod_{i=1}^{2} (2l_i + 1)(2L_i + 1) \right]^{-1/2} \\ &\quad \times \frac{(-1)^{L_1 + L_2 - M_1 - M_2} [(J+1)!]^{1/2}}{2^{2\sigma}} \\ &\quad \times \sum_{ij} \frac{(-1)^m}{[\omega_1(i, j)]^{1/2}} Z\begin{pmatrix} l_1 & l_2 & L_1 & L_2 & \\ m_1 & m_2 & -M_1 & -M_2 & (i, j) \end{pmatrix} \\ &\quad \times \omega_2(i, j) C^{ij}_{(n_1 n_2, N_1 N_2)} (\sin \phi)^{L_1 + l_1 - 2j} (\cos \phi)^{L_2 - l_1 + 2(i+j)}, \end{aligned} \tag{4.15}$$

avec

$$C^{ij}_{(n_1n_2,N_1N_2)} = \left(\frac{(T+1)!}{\omega_2(i,j)}\right)^{1/2} (-1)^{T/2-i} \sum_{\mu_1\mu_2\mu_3} Z\begin{pmatrix} t_1 & t_2 & t_3 & t_4 & (i,j) \\ \mu_1 & \mu_2 & \mu_3 & \mu_4 & \end{pmatrix}$$
$$\times\, {}^{\sigma}P^{(n'_1,n'_2)}_{(N'_1,N'_2)}(\phi)\left[\prod_{i=1}^{4} (t_i+\mu_i)!\,(t_i-\mu_i)!\right]^{-1/2}, \tag{4.16}$$

où

$$\left.\begin{aligned} t_1+\mu_1+N'_1 &= N_1, & t_3-\mu_3+n'_1 &= n_1, \\ t_2+\mu_2+N'_2 &= N_2, & t_4-\mu_4+n'_2 &= n_2. \end{aligned}\right\} \tag{4.17}$$

Il faut noter que l'expression (4.15) est particulièrement adaptée à un calcul machine. A ce sujet nous pouvons faire les remarques suivantes. Pour calculer les coefficients de Talmi, nous avons utilisé les expressions (4.10) et (4.11) qui donnent les coefficients Z les indices i et j devant satisfaire les relations (4.7), ceci entraîne que le nombre de coefficients Z est limité. Par ailleurs, leurs propriétés de symétrie diminuent considérablement le nombre des coefficients à calculer. Le calcul des coefficients

$${}^{\sigma}P^{(n'_1,n'_2)}_{(N'_1,N'_2)}(\phi)$$

s'obtient à l'aide de la relation (4.13) et le nombre de ces coefficients qu'il faut calculer est grandement diminué du fait des symétries qu'ils présentent. Connaissant les coefficients Z et

$${}^{\sigma}P^{(n'_1,n'_2)}_{(N'_1,N'_2)}(\phi),$$

il est aisé de calculer les coefficients $C^{ij}_{(n_1n_2,N_1N_2)}$ d'après la relation (4.16) en tenant compte de (4.17) qui limite le domaine des valeurs des indices μ_1, μ_2, μ_3 et restreint les opérations de calcul.

4.2. *Coefficients $\langle 0l_1-l_1(\boldsymbol{r}_1)0l_2m_2(\boldsymbol{r}_2)|N_1(\boldsymbol{R}_1)N_2(\boldsymbol{R}_2)\rangle$ et formules de récurrence*

Nous allons traiter un cas particulier où dans l'expression générale des coefficients de Talmi deux nombres quantiques radiaux sont nuls et un nombre quantique magnétique prend sa valeur minimale. Dans le cas où $n_1=n_2=0$ l'expression (4.16) devient:

$$C^{ij}_{(00,N_1N_2)} = (-1)^{N_2}\frac{(N_1+N_2)!}{N_1!\,N_2!}\delta_{i,N_1+N_2}\delta_{n,0}, \tag{4.18}$$

si nous prenons $m_1=-l_1$ nous obtenons à partir de la relation (4.10) une expression des coefficients Z que nous reportons dans la relation (4.15). Ceci nous amène à l'expression nouvelle:

$$\langle 0l_1-l_1(\boldsymbol{r}_1)0l_2m_2(\boldsymbol{r}_2)|N_1(\boldsymbol{R}_1)N_2(\boldsymbol{R}_2)\rangle$$
$$= \frac{(-1)^{N_2}}{N_1!\,N_2!}\,\frac{[\Pi_{i=1}^2\,(2L_i+1)(2l_i+1)]^{1/2}}{(4\pi)^2}$$
$$\times \prod_{i=1}^{2} (N_{N_iL_i}N_{0l_i})[(2l_1)!\,(l_2+m_2)!\,(l_2-m_2)!]^{1/2}$$
$$\times\left(\frac{(L_1-M_1)!\,(L_2-M_2)!}{(L_1+M_1)!\,(L_2+M_2)!}\right)^{1/2} \sin\phi^{L_1+l_1}\cos\phi^{l_2-L_1}$$

$$\times \sum_j \frac{(2L_1-2j)!\,(2\Delta+2j)!}{(L_1-M_1-2j)!\,(2\Delta-L_2-M_2+2j)!\,(l_1-N_1-N_2-j)!}$$
$$\times \frac{1}{(\Delta+j)!\,(L_1-j)!}\,\frac{(\cot^2\phi)^j}{j!}. \tag{4.19}$$

Pour le calcul numérique des coefficients de Talmi dans le cas général nous pouvons alors utiliser l'expression précédente conjointement avec deux formules de récurrence que nous établissons maintenant.

Nous reportons la relation (4.11) dans l'expression (4.15) et nous obtenons une relation de récurrence entre les coefficients de Talmi (relation de récurrence qui peut aussi être obtenue à partir de l'expression (2.5)), à savoir:

$$\sum_{i=1}^{2} [(l_i-m_i)(l_i+m_i+1)]^{1/2} \langle 0l_1(m_1+\delta_{i,1})(\boldsymbol{r}_1)0l_2(m_2+\delta_{i,2})(\boldsymbol{r}_2)|N_1(\boldsymbol{R}_1)N_2(\boldsymbol{R}_2)\rangle$$
$$= \sum_{i=1}^{2} [(L_i+M_i)(L_i-M_i+1)]^{1/2} \langle 0l_1m_1(\boldsymbol{r}_1)0l_2m_2(\boldsymbol{r}_2)|$$
$$\times N_1L_1(M_1+\delta_{i,1})(\boldsymbol{R}_1)N_2L_2(M_2+\delta_{i,2})(\boldsymbol{R}_2)\rangle. \tag{4.20}$$

Ainsi nous arrivons à calculer tous les coefficients

$$\langle 0l_1m_1(\boldsymbol{r}_1)0l_2m_2(\boldsymbol{r}_2)|N_1(\boldsymbol{R}_1)N_2(\boldsymbol{R}_2)\rangle$$

en utilisant (4.20) et (4.19).

Les autres coefficients de Talmi s'obtiennent en utilisant de plus la relation de récurrence suivante:

$$\langle n_1(\boldsymbol{r}_1)n_2(\boldsymbol{r}_2)|N_1(\boldsymbol{R}_1)N_2(\boldsymbol{R}_2)\rangle$$
$$= \cos^2\phi\left(\frac{N_1+L_1+\frac{1}{2}}{n_1}\right)^{1/2} \langle n_1-1l_1m_1(\boldsymbol{r}_1)n_2(\boldsymbol{r}_2)|N_1-1L_1M_1(\boldsymbol{R}_1)N_2(\boldsymbol{R}_2)\rangle$$
$$+ \sin^2\phi\left(\frac{N_1+L_1+\frac{1}{2}}{n_2}\right)^{1/2} \langle n_1-1l_1m_1(\boldsymbol{r}_1)n_2(\boldsymbol{r}_2)|N_1(\boldsymbol{R}_1)N_2-1L_2M_2(\boldsymbol{R}_2)\rangle$$
$$-\frac{\sin 2\phi}{n_1} \sum_{\nu=-1}^{+1} \{(N_1+L_1+\tfrac{1}{2})(N_2+L_2+\tfrac{1}{2})[n_1-1,\, n_2|N_1L_1-1,\, N_2L_2-1]$$
$$-(N_1+L_1+\tfrac{1}{2})[n_1-1,\, n_2|N_1L_1-1,\, N_2-1L_2+1]$$
$$-(N_2+L_2+\tfrac{1}{2})[n_1-1,\, n_2|N_1-1L_1+1,\, N_2L_2-1]$$
$$+[n_1-1,\, n_2|N_1-1,\, L_1+1,\, N_2-1,\, L_2+1]\}, \tag{4.21}$$

avec

$$[n_1',\, n_2'|N_1'L_1',\, N_2'L_2']$$
$$= \prod_{i=1}^{2} \frac{N_{n_il_i}N_{N_iL_i}}{N_{n_i'l_i'}N_{N_i'L_i'}}(-1)^{(L_1'+L_2'+L_1+L_2+2)/2}$$
$$\times \begin{pmatrix} 1 & L_1 & L_1' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & L_2 & L_2' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \prod_{i=1}^{2} (2L_i+1)^{1/2}$$
$$\times \langle n_1'l_1m_1(\boldsymbol{r}_1)n_2'l_2m_2(\boldsymbol{r}_2)|N_1'L_1'(M_1+\nu)(\boldsymbol{R}_1)N_2'L_2'(M_2-\nu)(\boldsymbol{R}_2)\rangle.$$

(Nous avons obtenu la relation (4.21) en utilisant les propriétés des polynômes de Laguerre et des harmoniques sphériques.) L'expression (4.19) et les formules de récurrence (4.20) et (4.21) permettent une autre alternative de calcul des coefficients de Talmi beaucoup plus simple que la méthode habituelle. Habituellement pour calculer les coefficients de Talmi on utilise l'expression des coefficients de Moshinsky et Smirnov. On part de l'expression donnée par Efros (1973) dans le cas où deux nombres quantiques principaux sont nuls qui est à notre avis l'expression la plus simple des coefficients de Moshinsky et Smirnov dans ce cas particulier puis on utilise des formules de récurrence qui permettent le calcul de tous les autres coefficients de Moshinsky et Smirnov; enfin utilisant ces derniers et la relation (2.6) on aboutit à l'expression des coefficients de Talmi.

Notre méthode est plus avantageuse que la méthode habituelle parce qu'elle est plus directe; en effet les deux méthodes font intervenir des formules de récurrence analogues mais le calcul de l'expression (4.19) est plus rapide que le calcul de l'expression de Efros (1973) parce qu'elle ne contient qu'une sommation sur un seul indice et la méthode habituelle est encore plus longue que la notre du fait de l'emploi de la relation (2.6).

4.3. Autres cas particuliers

Dans le cas où $n_1 = l_1 = m_1 = 0$, la relation (4.15) se simplifie considérablement et, à l'aide des expressions (4.14) et (4.10), conduit à:

$$\begin{aligned}\langle 0(\boldsymbol{r}_1), n_2(\boldsymbol{r}_2)|N_1(\boldsymbol{R}_1), N_2(\boldsymbol{R}_2)\rangle \\ &= (-1)^{N_1+N_2+n_2}\frac{n_2!}{N_1!N_2!}\frac{N_{N_1L_1}N_{N_2L_2}}{N_{00}N_{n_2l_2}}\left[(2l_2+1)\prod_{i=1}^{2}(2L_i+1)\right]^{1/2} \\ &\times\begin{pmatrix} l_2 & L_1 & L_2 \\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix} l_2 & L_1 & L_2 \\ -m_2 & M_1 & M_2\end{pmatrix}\sin\phi^{L_1+2N_1}\cos\phi^{L_2+2N_2}.\end{aligned}$$

Nous constatons que cette dernière expression est la même que celle obtenue par Kumar (1966a).

Dans le cas où tous les indices sont nuls sauf les n_i et N_i, nous avons:

$$\langle n_100(\boldsymbol{r}_1)n_200(\boldsymbol{r}_2)|N_100(\boldsymbol{R}_1)N_200(\boldsymbol{R}_2)\rangle = \frac{\Pi_{i=1}^2 N_{n_i0}N_{N_i0}}{(4\pi)^2}\sigma P^{(n_1,n_2)}_{(N_1,N_2)}(\phi),$$

qui est difficile à obtenir par la méthode de Kumar (1966a).

Dans les autres cas particuliers, pour obtenir les autres coefficients par exemple, dans le cas où $n_1 = 0$ et où les autres nombres quantiques sont différents de zéro il suffit de poser $s_1 = 0$ dans l'expression (4.3) puis de la développer et enfin de la comparer à l'expression (4.2) où on pose aussi $s_1 = 0$.

5. Coefficients de Moshinsky et Smirnov

5.1. Fonction génératrice de la base de la représentation couplée

Pour calculer les coefficients de Moshinsky et Smirnov 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 $G(z, \xi^0, r)$ et de la fonction génératrice $\Psi(\xi, \eta, \tau)$ des symboles 3-jm. La fonction génératrice de la base de la représentation couplée de deux moments angulaires dans l'espace de Bargmann introduite par Schwinger (1965) s'écrit:

$$\Psi(\xi,\eta,\tau)=\sum_{\substack{j_1j_2j_3\\ m_1m_2m_3}}\Phi_{j_1m_1}(\xi^1)\Phi_{j_2m_2}(\xi^2)\Phi_{j_3m_3}(\xi^3)\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3\\ m_1 & m_2 & m_3\end{pmatrix}\epsilon_{j_1j_2j_3}(\tau)$$

$$=\exp(\tau_1[\xi^2\xi^3]+\tau_2[\xi^3\xi^1]+\tau_3[\xi^1,\xi^2]),\tag{5.1}$$

où

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

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:

$$\int\overline{\Phi_{lm}(\xi)}\left(\frac{2l+1}{4\pi}\right)^{1/2}\frac{(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{r})^l}{2^l l!}\,\mathrm{d}\mu(\xi)=y_{lm}(\boldsymbol{r}).\tag{5.2}$$

En remplaçant dans (2.2) les coefficients de Clebsch et Gordan par les symboles 3-jm et les harmoniques sphériques par leur expression (5.2), nous obtenons:

$$|n_1(\boldsymbol{r}_1)n_2(\boldsymbol{r}_2);\,l_3m_3\rangle$$

$$=\frac{(-1)^{l_1-l_2+m_3}}{\pi^{3/2}}N_{n_1l_1}N_{n_2l_2}\frac{[\Pi_{i=1}^3(2l_i+1)]^{1/2}}{4\pi}$$

$$\times\int\sum_{m_1m_2}\begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3\\ m_1 & m_2 & m_3\end{pmatrix}\overline{\Phi_{l_1m_1}(\xi^1)}\,\overline{\Phi_{l_2m_2}(\xi^2)}\exp\left(-\frac{\boldsymbol{r}_1^2+\boldsymbol{r}_2^2}{2}\right)$$

$$\times L_{n_1}^{(l_1+1/2)}(\boldsymbol{r}_1^2)L_{n_2}^{(l_2+1/2)}(\boldsymbol{r}_2^2)\frac{(\boldsymbol{b}_1\cdot\boldsymbol{r}_1)^{l_1}}{2^{l_1}l_1!}\frac{(\boldsymbol{b}_2\cdot\boldsymbol{r}_2)^{l_2}}{2^{l_2}l_2!}\,\mathrm{d}\mu\,(\xi^1)\,\mathrm{d}\mu\,(\xi^2).\tag{5.3}$$

En multipliant (5.3) par

$$4\pi\frac{z_1^{n_1}z_2^{n_2}}{N_{n_1l_1}N_{n_2l_2}}\frac{(-1)^{l_1-l_2+m_3}}{[\Pi_{i=1}^3(2l_i+1)]^{1/2}}\overline{\Phi_{l_3m_3}(\xi^3)}\,\overline{\epsilon_{l_1l_2l_2}(\tau)},$$

et en effectuant la sommation sur n_1, l_1, n_2, l_2, l_3, m_3 nous obtenons la fonction génératrice de la représentation couplée que nous noterons $G(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)$:

$$G(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)=\sum_{\substack{n_1l_1\\ n_2l_2\\ m_3l_3}}4\pi\frac{z_1^{n_1}z_2^{n_2}}{N_{n_1l_1}N_{n_2l_2}}\frac{(-1)^{l_1-l_2+m_3}}{[\Pi_{i=1}^3(2l_i+1)]^{1/2}}$$

$$\times\overline{\Phi_{l_3m_3}(\xi^3)}\,\overline{\epsilon_{l_1l_2l_3}(\tau)}|n_1(\boldsymbol{r}_1)n_2(\boldsymbol{r}_2);\,l_3m_3\rangle.$$

De plus en utilisant une fois l'expression (5.3) et deux fois l'expression (3.4) nous obtenons:

$$G(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)=\int\left[\sum_{\substack{l_1l_2l_3\\ m_1m_2m_3}}\begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3\\ m_1 & m_2 & m_3\end{pmatrix}\overline{\epsilon_{l_1l_2l_3}(\tau)}\prod_{i=1}^3\overline{\Phi_{l_im_i}(\xi^i)}\right]$$

$$\times\prod_{i=1}^2 G(z_i,\xi^i,r_i)\,\mathrm{d}\mu(\xi^1)\,\mathrm{d}\mu(\xi^2).\tag{5.4}$$

Dans (5.4) nous pouvons remplacer la quantité entre crochets par le conjugué de l'expression (5.1). En effet, 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 de ce fait l'intégration dans l'expression (5.4) où le crochet a été remplacé par le conjugué de (5.1) donne une contribution nulle lorsque l_1 ou l_2 est demi-entier. Nous obtenons ainsi:

$$G(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = \int \overline{\psi(\xi, \eta, \tau)} \prod_{i=1}^{2} G(z_i, \xi^i, r_i)\, \mathrm{d}\mu(\xi^1)\, \mathrm{d}\mu(\xi^2). \tag{5.5}$$

Notons que ce procédé peut facilement être généralisé pour obtenir la fonction génératrice de la représentation couplée de plusieurs particules: il faut faire varier i de 1 à n dans la relation (5.5) et il faut remplacer $\psi(\xi, \eta, \tau)$ par la fonction génératrice de la représentation couplée de n moments angulaires (Schwinger 1965) dans l'espace de Bargmann.

5.2. Coefficients de Moshinsky et Smirnov

La fonction génératrice G_{MS} des coefficients de Moshinsky et Smirnov est le recouvrement de la fonction génératrice de la représentation couplée dans la représentation $(\boldsymbol{R}_1, \boldsymbol{R}_2)$ et dans la représentation $(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$ (voir (5.5)). Ainsi à l'aide de (5.5) et de (5.4) nous pouvons écrire l'expression de G_{MS} sous la forme intégrale:

$$\begin{aligned} G_{\mathrm{MS}} &= \int G(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)\overline{G(\boldsymbol{R}_1, \boldsymbol{R}_2)}\, \mathrm{d}\boldsymbol{R}_1\, \mathrm{d}\boldsymbol{R}_2 \\ &= \int \overline{\Psi(\xi, \eta, \tau)}\Psi(\xi', \eta', \tau') \int \prod_{i=1}^{2} (G(s_i, \xi^i, r_i)\overline{G(S_i, \xi'^i, R_i)})\, \mathrm{d}\boldsymbol{R}_1\, \mathrm{d}\boldsymbol{R}_2 \\ &\quad \times \prod_{i=1}^{2} \mathrm{d}\mu(\xi^i)\, \mathrm{d}\mu(\xi'^i), \end{aligned} \tag{5.6}$$

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

$$\begin{aligned} G_{\mathrm{MS}} = \sum_{\substack{n_1 n_2 l_1 l_2 \\ N_1 N_2 L_1 L_2 \\ \lambda\mu}} & \frac{(4\pi)^2}{2\lambda+1} \prod_{i=1}^{2} \left(\frac{s_i^{n_i} \bar{S}_i^{N_i}}{N_{n_i l_i} N_{N_i L_i}} \right) \overline{\Phi_{\lambda\mu}(\xi^3)} \Phi_{\lambda\mu}(\xi'^3) \overline{\epsilon_{l_1 l_2 \lambda}(\tau)} \epsilon_{L_1 L_2 \lambda}(\tau') \\ & \times \left(\prod_{i=1}^{2} [l_i][L_i] \right)^{-1/2} \langle N_1(\boldsymbol{R}_1) N_2(\boldsymbol{R}_2);\lambda | n_1(\boldsymbol{r}_1) n_2(\boldsymbol{r}_2);\lambda \rangle, \end{aligned} \tag{5.7}$$

avec

$$[L_i] = 2L_i + 1 \qquad \text{et} \qquad [l_i] = 2l_i + 1.$$

La quantité

$$\int \prod_{i=1}^{2} (G(s_i, \xi^i, r_i)\overline{G(S_i, \xi'^i, R_i)})\, \mathrm{d}\boldsymbol{R}_1\, \mathrm{d}\boldsymbol{R}_2$$

représente la fonction génératrice des coefficients de Talmi et nous la remplaçons par son expression (4.4). Nous utilisons alors (Bargmann 1962):

$$\begin{aligned} \int & \overline{\psi(\xi, \eta, \tau)}\psi(\xi', \eta', \tau')\, \mathrm{e}^{E(t)} \prod_{i=1}^{2} (\mathrm{d}\mu(\xi^i)\, \mathrm{d}\mu(\xi'^i)) \\ &= \frac{1}{S^2} \exp\left[\frac{(\overline{\xi^3}\xi'^3)}{S} (-\tau_2'\bar{\tau}_1 t_4 + \tau_2'\bar{\tau}_2 t_2 + \tau_1'\bar{\tau}_1 t_5 - \tau_1'\bar{\tau}_2 t_3) \right], \end{aligned} \tag{5.8}$$

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

$$S=1-\overline{\tau_3}t_1-\tau'_3t_6+\tau'_3\overline{\tau_3}(t_1t_6-t_2t_5+t_3t_4).$$

Ainsi nous pouvons effectuer l'intégration dans l'expression (5.6).

En tenant compte de l'expression des coefficients de Clebsch et Gordan (voir Edmonds (1957)) nous obtenons:

$$\begin{aligned}G_{\mathrm{MS}}=\sum_{\substack{l_1l_2L_1L_2\\ \lambda\mu}}&\frac{(-1)^{J_2}(J_1+1)!\,(J_2+1)!}{2^{2\sigma}[(J_2-2L_1)!\,(J_2-2L_2)!\,(J_1-2l_1)!\,(J_1-2l_2)!]^{1/2}}\frac{1}{2\lambda+1}\\ &\times\sum_{ij}(-1)^m\frac{[(2j)!\,(2k)!\,(2l)!\,(2m)!]^{1/2}}{[(J_1-2i+1)!\,(J_1-2\lambda-2i)!]^{1/2}}\frac{1}{i!\,j!\,k!\,l!\,m!\,n!}\\ &\times\begin{pmatrix}j_1&j_2&j_3\\ m_1&m_2&m_3\end{pmatrix}\frac{\{2\}}{[P(s,\bar{S})]^{\sigma+3/2}}(\sin\phi)^{i+k+l+n}(\cos\phi)^{i+j+m+n}\\ &\times\frac{(\xi'_3\overline{\xi_3})^{\lambda+\mu}}{(\lambda+\mu)!}\frac{(\eta'_3\overline{\eta_3})^{\lambda-\mu}}{(\lambda-\mu)!}\\ &\times\overline{\tau_1^{J_1-2l_1}\tau_2^{J_1-2l_2}\tau_3^{J_1-2\lambda}}\tau_1'^{J_2-2L_1}\tau_2'^{J_2-2L_2}\tau_3'^{J_2-2\lambda},\end{aligned}\tag{5.9}$$

avec

$$\begin{aligned}&j_1=\frac{J_1-J_2}{2}+L_1-i, && j_2=\frac{J_1-J_2}{2}+L_2-i, && j_3=\lambda,\\ &m_1=j_1-2j, && m_2=2m-j_2, && m_3=-l_2+l_1,\\ &J_1=l_1+l_2+\lambda, && J_2=L_1+L_2+\lambda.\end{aligned}\tag{5.10}$$

En remplaçant $\{2\}$ et $1/[P(s,\bar{S})]^{\sigma+3/2}$ par leurs expressions respectives (4.9) et (4.12) dans l'expression (5.9) puis en comparant le résultat obtenu à la relation (5.7), nous obtenons l'expression des coefficients de Moshinsky et Smirnov:

$$\begin{aligned}&\langle N_1(\boldsymbol{R}_1)N_2(\boldsymbol{R}_2);\lambda\,|n_1(\boldsymbol{r}_1)n_2(\boldsymbol{r}_2);\lambda\rangle\\ &\quad=\frac{(-1)^{J_2}}{(4\pi)^2 2^{2\sigma}}[[l_1][l_2][L_1][L_2](J_1-2\lambda)!\,(J_2-2\lambda)!\,(J_1+1)!\,(J_2+1)!]^{1/2}\\ &\quad\times\prod_{i=1}^{2}(N_{n_il_i}N_{N_iL_i})\sum_{ij}(-1)^m\\ &\quad\times\frac{[(2j)!\,(2k)!\,(2l)!\,(2m)!]^{1/2}}{[(J_1-2i+1)!\,(J_1-2\lambda-2i)!]^{1/2}i!\,j!\,k!\,l!\,m!\,n!}\begin{pmatrix}j_1&j_2&j_3\\ m_1&m_2&m_3\end{pmatrix}\\ &\quad\times C^{ij}_{(n_1n_2,N_1N_2)}(\sin\phi)^{L_1+l_1-2j}(\cos\phi)^{L_2-l_1+2(i+j)},\end{aligned}\tag{5.11}$$

où les coefficients $C^{ij}_{(n_1n_2,N_1N_2)}$ sont donnés par l'expression (4.16) précédemment exposée ainsi que la méthode qui permet leur calcul numérique.

Comparée à l'expression des coefficients de Moshinsky et Smirnov donnée par Raynal (1976) (voir (12) et (61)) ou à l'expression donnée par Dobeš (1977) (voir (6)), notre expression dont la dérivation ne fait intervenir que des opérations mathématiques élémentaires s'avère nettement moins compliquée que celles de ces auteurs. Le programme de calcul des coefficients de Moshinsky et Smirnov est d'une mise en oeuvre rapide en partie du fait de la simplicité de l'expression formelle et d'autre part parce que les coefficients Z et les polynômes

$${}^{\sigma}P^{(n_1,n_2)}_{(N_1,N_2)}(\phi)$$

qui interviennent dans les étapes du calcul possèdent des propriétés de symétrie et que les indices ont un domaine de variation limité qui permet de réduire considérablement le temps de calcul-machine.

Dans l'appendice 2 nous exposons une autre manière d'obtenir une expression formelle permettant le calcul des coefficients de Moshinsky et Smirnov.

5.3. Cas particulier traité par Efros

Dans le cas où deux nombres quantiques principaux sont nuls, c'est-à-dire le cas traité par Efros (1973), nous déduisons simplement de l'expression (5.11) le résultat obtenu par cet auteur.

Il suffit de poser $n_1 = n_2 = 0$ pour obtenir:

$$C^{ij}_{(00,N_1N_2)} = (-1)^{N_2}\frac{(N_1+N_2)!}{N_1!\,N_2!}\delta_{i,N_1+N_2}$$

et de (5.10) nous déduisons que:

$$j_1 = L_1, \qquad j_2 = L_2, \qquad j_3 = \lambda.$$

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

$$j = \tfrac{1}{2}(l_1' + L_1 - t), \qquad k = \tfrac{1}{2}(l_1' - L_1 + t),$$
$$l = \tfrac{1}{2}(l_2' - L_2 + t), \qquad m = \tfrac{1}{2}(l_2' + L_2 - t),$$

avec

$$l_1' = l_1 - N_1 - N_2, \qquad l_2' = l_2 - N_1 - N_2.$$

En utilisant:

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

où n est entier, nous obtenons l'expression suivante des coefficients de Moshinsky et Smirnov donnée par Efros (1973):

$$\begin{aligned}\langle 0l_1(\boldsymbol{r}_1)0l_2(\boldsymbol{r}_2);\lambda|N_1(\boldsymbol{R}_1)N_2(\boldsymbol{R}_2);\lambda\rangle\\ &= (-1)^{N_2}(\tan\phi)^{N_1+N_2}(\cos\phi)^{l_1+l_2}\\ &\quad\times\left(\frac{[L_1][L_2](J_1-2\lambda)!\,(J_1+1)!\,2^{-(2L_1+2L_2+N_1+N_2)}}{N_1!\,N_2!(2l_1-1)!!\,(2l_2-1)!!\,[2(N_1+L_1)+1]!!\,[2(N_2+L_2)+1]!!}\right)^{1/2}\\ &\quad\times\sum_t(-1)^m\frac{[(2j)!\,(2k)!\,(2l)!\,(2m)!]^{1/2}}{j!\,k!\,l!\,m!}\begin{pmatrix}L_1 & L_2 & \lambda\\ l_1'-t & t-l_2' & l_2-l_1\end{pmatrix}(\tan\phi)^{2t}.\end{aligned} \tag{5.12}$$

Remarquons que dans le travail de Efros ces éléments sont notés:

$$\langle 0l_1(\boldsymbol{r}_1)0l_2(\boldsymbol{r}_2);\lambda|N_2(\boldsymbol{R}_2)N_1(\boldsymbol{R}_1);\lambda\rangle.$$

Efros calcule les coefficients de Moshinsky et Smirnov dans ce cas particulier en utilisant une propriété des symboles 9-j (voir Yutsis et Bandzaitis (1965)) tandis que dans notre méthode nous n'avons pas à faire état de cette propriété (qui est implicite) de telle sorte que le calcul se fait simplement en remplaçant, dans l'expression générale des coefficients de Moshinsky et Smirnov, les nombres quantiques par leur valeur particulière dans ce cas.

6. Relations entre les coefficients de Moshinsky et Smirnov

Nous allons établir des relations entre les coefficients de Moshinsky et Smirnov à l'aide de la fonction génératrice de la base sphérique (3.5) utilisée précédemment par Kumar (1966a) et Wong (1970). Ces relations sont particulièrement utiles pour vérifier les calculs numériques qui conduisent aux coefficients de Moshinsky et Smirnov.

Nous multiplions l'expression (2.2) de la base de la représentation couplée par

$$K(l_1, l_2, n_1, n_2) z_1^{2n_1+l_1} z_2^{2n_2+l_2}$$

où

$$K(l_1, l_2, n_1, n_2) = \frac{N_{n_1 l_1} N_{n_2 l_2} (-1)^{n_1+n_2+l_1+l_2}}{n_1!\, n_2!} \left[\frac{(2l_1+1)(2l_2+1)}{4\pi}\right]^{1/2} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & \lambda \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

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:

$$\sum_{\substack{n_1 l_1 \\ n_2 l_2}} K(l_1, l_2, n_1, n_2) z_1^{2n_1+l_1} z_2^{2n_2+l_2} |n_1(\boldsymbol{r}_1) n_2(\boldsymbol{r}_2); \lambda\mu\rangle$$
$$= \left(\frac{1}{\pi}\right)^{3/2} \iint y_{\lambda\mu}(\theta'\phi') \exp[-z_1^2 - z_2^2 + 2\boldsymbol{z}_1 \cdot \boldsymbol{r}_1 + 2\boldsymbol{z}_2 \cdot \boldsymbol{r}_2 - \tfrac{1}{2}(\boldsymbol{r}_1^2 + \boldsymbol{r}_2^2)]$$
$$\times \sin\theta'\, d\theta'\, d\phi', \tag{6.1}$$

avec $\boldsymbol{z}_1 = z_1 \boldsymbol{i}$ et $\boldsymbol{z}_2 = z_2 \boldsymbol{i}$ où $\boldsymbol{i}$ est un vecteur unitaire du type $\boldsymbol{i} = \boldsymbol{i}(\theta, \phi)$. Nous reconduisons les mêmes calculs pour la deuxième fonction d'onde $|N_1(\boldsymbol{R}_1) N_2(\boldsymbol{R}_2); \lambda\mu\rangle$.

A partir du résultat ainsi obtenu et de l'expression (6.1) nous déduisons:

$$\sum_{\substack{n_1 l_1 n_2 l_2 \\ N_1 L_1 N_2 L_2}} K(L_1, L_2, N_1, N_2) K(l_1, l_2, n_1, n_2) z_1'^{2n_1+l_1} z_2'^{2n_2+l_2}$$
$$\times z_1^{2N_1+L_1} z_2^{2N_2+L_2} \langle N_1(\boldsymbol{R}_1) N_2(\boldsymbol{R}_2); \lambda\mu | n_1(\boldsymbol{r}_1) n_2(\boldsymbol{r}_2); \lambda\mu\rangle$$
$$= \frac{1}{\pi^3} \int \overline{y_{\lambda\mu}(\theta, \phi)} y_{\lambda\mu}(\theta', \phi') \exp[Q(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{R}_1, \boldsymbol{R}_2)]\, d\boldsymbol{R}_1\, d\boldsymbol{R}_2, \tag{6.2}$$

avec

$$Q(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{R}_1, \boldsymbol{R}_2)$$
$$= -(z_1^2 + z_2^2 + z_1'^2 + z_2'^2) + 2(\boldsymbol{z}_1 \cdot \boldsymbol{r}_1 + \boldsymbol{z}_2 \cdot \boldsymbol{r}_2 + \boldsymbol{z}_1' \cdot \boldsymbol{R}_1 + \boldsymbol{z}_2' \cdot \boldsymbol{R}_2)$$
$$- \tfrac{1}{2}(\boldsymbol{r}_1^2 + \boldsymbol{r}_2^2 + \boldsymbol{R}_1^2 + \boldsymbol{R}_2^2),$$

où

$$\boldsymbol{z}_1 = z_1 \boldsymbol{i}, \qquad \boldsymbol{z}_2 = z_2 \boldsymbol{i}, \qquad \boldsymbol{z}_1' = z_1' \boldsymbol{j}, \qquad \boldsymbol{z}_2' = z_2' \boldsymbol{j},$$
$$\boldsymbol{i} = \boldsymbol{i}(\theta, \phi), \qquad \boldsymbol{j} = \boldsymbol{j}(\theta', \phi').$$

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

$$\sum_{\substack{n_1l_1n_2l_2\\N_1L_1N_2L_2}} K(L_1, L_2, N_1, N_2)K(l_1, l_2, n_1, n_2)\langle N_1(\boldsymbol{R}_1)N_2(\boldsymbol{R}_2); \lambda|n_1(\boldsymbol{r}_1)n_2(\boldsymbol{r}_2); \lambda\rangle$$
$$= \frac{2\pi^{3/2}(-1)^{2N_2+L_2}(2n'+\lambda)!}{\Gamma(n'+1)\Gamma(n'+\lambda+\frac{3}{2})[(2N_1+L_1)!(2N_2+L_2)!(2n_1+l_1)!(2n_2+l_2)!]^{1/2}}$$
$$\times d^J_{(M,M')}(2\phi), \tag{6.3}$$

avec

$$n' = (N_1+N_2)+\frac{L_1+L_2-\lambda}{2}, \qquad M' = -(N_1-N_2)-\frac{L_1-L_2}{2},$$
$$M = -(n_1-n_2)-\frac{l_1-l_2}{2}, \qquad J = (N_1+N_2)+\frac{L_1+L_2}{2}.$$

Enfin $d^J_{(M,M')}(2\phi)$ 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

$$2n_1+l_1 = x, \qquad 2n_2+l_2 = y,$$
$$2N_1+L_1 = z, \qquad 2N_2+L_2 = t,$$

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

7. Conclusion

Une fonction génératrice de la base sphérique de l'oscillateur harmonique a été construite puis utilisée pour calculer par des opérations mathématiques élémentaires les coefficients de Talmi et les coefficients de Moshinsky et Smirnov en suivant la méthode de travail de Bargmann (1962) et Schwinger (1965).

Le développement de la fonction génératrice des coefficients de Talmi s'impose naturellement dans la base de la représentation symétrique (Kumar 1966b) et nous donne une expression des coefficients de Talmi qui est nouvelle, qui possède une symétrie équivalente à celle qu'on observe dans l'expression donnée par Kumar (1966a) et qui ne fait pas intervenir les symboles 9-*j*. L'expression des coefficients de Talmi peut être facilement programmée, elle permet un calcul rapide des coefficients en raison des symétries qui apparaissent, du fait que beaucoup de coefficients sont nuls et que les indices de sommation ont un domaine de variation limité. De cette nouvelle expression des coefficients de Talmi nous déduisons naturellement le calcul des coefficients dans des cas particuliers, retrouvant ainsi certains résultats de la littérature et en obtenant de nouveaux. Dans le cas où deux nombres quantiques radiaux sont nuls et où un nombre quantique magnétique est minimal, nous obtenons une expression simple des coefficients de Talmi qui ne contient qu'un seul indice de sommation et qui nous paraît particulièrement intéressante non seulement par elle-même mais surtout parce qu'elle permet la déduction par récurrence de tous les autres coefficients.

De la fonction génératrice des coefficients de Moshinsky et Smirnov nous déduisons une expression nouvelle de ces coefficients où n'apparaissent que des symboles 3-*jm* et des coefficients de la représentation symétrique (Kumar 1966b) calculés à partir des symboles 3-*jm*. Tous ces éléments possèdent de remarquables propriétés de symétrie; de plus un grand nombre d'entre eux s'avèrent nuls ce qui diminue considérablement le nombre des opérations de calcul numérique. Notre expression est particulièrement simple en comparaison de l'expression proposée par Raynal (1976) (voir (12) et (61)) et de l'expression récemment proposée par Dobeš (1977) (voir (6)) et elle se prête à un calcul numérique rapide des coefficients de Moshinsky et Smirnov. Dans le cas où deux nombres quantiques principaux sont nuls nous retrouvons, par simple remplacement des indices par leur valeur, l'expression donnée par Efros (1973) sans être obligé de faire appel aux propriétés des symboles 9-*j*. Cet exemple est significatif car il illustre l'intérêt de la méthode que nous utilisons; en effet notre méthode se prête à une généralisation dans les cas où la base de la représentation est fonction des coordonnées de plus de deux particules, le calcul des éléments des matrices des transformations de Moshinsky et Smirnov pouvant être effectué sans connaissance préalable des symboles 3*n*-*j*, résultat que les autres méthodes ne peuvent pas atteindre. De la fonction génératrice des coefficients de Moshinsky et Smirnov nous déduisons, dans l'appendice 2, une autre expression des coefficients de Moshinsky et Smirnov qui peut se comparer avantageusement à l'expression donnée par Dobeš (1977) car elle est moins compliquée; de plus elle contient des coefficients qui possèdent des symétries ce qui présente un grand intérêt dans les calculs numériques en minimisant le temps-machine.

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

Pour finir, signalons que notre fonction génératrice de la base sphérique de l'oscillateur harmonique 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.

Appendice 1

Nous donnons d'abord la définition des coefficients Z, puis nous les comparons aux coefficients S introduits par Kumar (1966b).

Les coefficients Z sont déduits de l'expression ci-dessous:

$$\prod_{i<j} [\xi^i\xi^j]^{\alpha_{ij}} \prod_{i=1}^{4} \delta_{\Sigma_j \alpha_{ij}, 2j_i} = \left(\frac{(J+1)!}{\omega}\right)^{1/2} \sum_m Z\begin{pmatrix} j_1 & \dots & j_4 \\ m_1 & \dots & m_4 \end{pmatrix} \prod_{i=1}^{4} \Phi_{j_i m_i}(\xi^i),$$
$$J = \sum_{i=1}^{4} j_i, \tag{A1.1}$$

où les α_{ij} sont des entiers positifs et où $\omega = (\Pi_{i<j}\, \alpha_{ij}!)^{-1}$ avec $i, j = 1, 2, 3, 4$. Si nous divisons les deux membres de l'expression (A1.1) par $\Pi_{i=1}^{4} \eta_i^{2j_i}$ et si nous posons $\xi^i/\eta_i = t_i$, nous obtenons le résultat suivant:

$$\left(\frac{\omega}{(J+1)!}\right)^{1/2} \prod_{i<j} (t_i - t_j)^{\alpha_{ij}} = \sum_m Z\begin{pmatrix} j_1 & \dots & j_4 \\ m_1 & \dots & m_4 \end{pmatrix} \prod_{i=1}^{4} \frac{t_i^{j_i+m_i}}{[(j_i+m_i)!\,(j_i-m_i)!]^{1/2}}. \tag{A1.2}$$

En comparant l'expression (A1.2) à l'expression (4.1) donnée par Kumar 1966b), nous remarquons que la seule différence consiste dans la façon d'ordonner les termes du produit désigné par $\Pi_{i<j}(t_i-t_j)^{\alpha_{ij}}$ dans l'expression (A1.2) et noté $\Pi^e_{i,j}(t_i-t_j)^{\alpha_{ij}}$ dans l'expression (4.1) de Kumar (1966b). Ceci explique que les coefficients Z et les coefficients S ne diffèrent que par un facteur de phase. Plus précisément on a:

$$Z=(-1)^{\alpha_{13}+\alpha_{24}}S.$$

Il est clair de ce fait que les coefficients Z possèdent des propriétés de symétrie identiques à celles des coefficients S. Ainsi, en permutant les colonnes (j_l, m_l) et (j_k, m_k), il vient:

$$\begin{aligned} Z\begin{pmatrix} \dots j_l \dots j_k \dots \\ \dots m_l \dots m_k \dots \end{pmatrix} &= (-1)^{\alpha_{13}+\alpha_{24}} S\begin{pmatrix} \dots j_l \dots j_k \dots \\ \dots m_l \dots m_k \dots \end{pmatrix} \\ &= (-1)^{\alpha_{13}+\alpha_{24}}(-1)^{2(j_k+j_l)-\alpha_{kl}} S\begin{pmatrix} \dots j_k \dots j_l \dots \\ \dots m_k \dots m_l \dots \end{pmatrix} \\ &= (-1)^{2(j_k+j_l)-\alpha_{kl}} Z\begin{pmatrix} \dots j_k \dots j_l \dots \\ \dots m_k \dots m_l \dots \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{A1.3}$$

De même, on peut montrer que:

$$Z\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 & j_4 \\ -m_1 & -m_2 & -m_3 & -m_4 \end{pmatrix} = (-1)^{\sum_{i=1}^4 j_i} Z\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 & j_4 \\ m_1 & m_2 & m_3 & m_4 \end{pmatrix}. \tag{A1.4}$$

Appendice 2

Dans l'expression de la fonction génératrice des coefficients de Moshinsky et Smirnov (5.9) la présence de $\{2\}/[P(s,\bar{S})]^{\sigma+3/2}$ qui peut être développé de plusieurs manières entraîne la possibilité d'obtenir plusiers types de formules donnant les coefficients de Moshinsky et Smirnov. Nous exposons ici une autre manière d'obtenir une expression formelle, fonction des symboles 3-*jm*, qui permet le calcul des coefficients de Moshinsky et Smirnov.

Nous remarquons qu'en posant:

$$S_1=\frac{\xi_1}{\eta_1}, \qquad S_2=\frac{\xi_2}{\eta_2}, \qquad s_1=-\frac{\overline{\xi_1'}}{\overline{\eta_1'}}, \qquad s_2=\frac{\overline{\xi_2'}}{\overline{\eta_2'}},$$

la quantité dans l'accolade $\{2\}$ de l'expression (5.18) s'écrit:

$$\{2\}=(-1)^n\frac{[[\xi^1\xi^2]^i(\xi^2\overline{\xi'^2})^j(\xi^1\overline{\xi'^2})^k(\xi^2\overline{\xi'^1})^l(\xi^1\overline{\xi'^1})^m[\overline{\xi'^2}\,\overline{\xi'^1}]^n]}{\eta_1^{i+k+m}\eta_2^{i+j+l}\bar{\eta}_1'^{l+m+n}\bar{\eta}_2'^{j+k+n}}. \tag{A2.1}$$

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 (A2.1) que nous noterons [ ], s'écrit:

$$[\ ]=\sum_{\substack{t_1t_2t_1't_2'\\ t\mu t'\mu'}}\langle t_1t_2t\mu;t_1't_2't'\mu'|[\ ]\rangle\Phi_{t_1t_2(t\mu)}(\xi^1\xi^2)\overline{\Phi_{t_1't_2'(t'\mu')}(\xi'^1\xi'^2)},$$

avec

$$\langle t_1 t_2 t\mu\,;\, t'_1 t'_2 t'\mu' \|[\ ]\rangle$$
$$= \int \overline{\Phi_{t_1t_2(t\mu)}(\xi^1\xi^2)}\Phi_{t'_1t'_2(t'\mu')}(\xi'^1\xi'^2)[\ ]\prod_{i=1}^{2}[\mathrm{d}\mu(\xi^i)\,\mathrm{d}\mu(\xi'^i)].$$

Le calcul de l'intégrale dans l'expression ci-dessus peut être mené à bien à l'aide de l'expression (5.8). Ceci conduit à:

$$\langle t_1 t_2 t\mu\,;\, t'_1 t'_2 t'\mu' \|[\ ]\rangle$$
$$= \sum_{tt_3} (-1)^{T-2t_3}\left(\frac{(T_1+1)!\,(T_2+1)!\,j!\,k!\,l!\,m!}{(T_1-i+1)!\,(T_1-2t-i)!}\right)^{1/2}$$
$$\times\left(\prod_{\alpha=1}^{2}[(T_1-2t_\alpha)!\,(T_2-2t'_\alpha)!](T_1-2t)!\,(T_2-2t)!\right)^{1/2}\begin{pmatrix} j'_1 & j'_2 & j'_3 \\ m'_1 & m'_2 & m'_3 \end{pmatrix}$$
$$\times\Phi_{t_1t_2(t\mu)}(\xi^1\xi^2)\Phi_{t'_1t'_2(t\mu)}(\overline{\xi'^1}\,\overline{\xi'^2}), \tag{A2.2}$$

avec

$$T_1 = t_1+t_2+t_3, \qquad T_2 = t'_1+t'_2+t'_3, \qquad t_3 = t'_3 = t,$$
$$t_1 = \frac{l_1+\Delta}{2}, \qquad t_2 = \frac{l_2-\Delta}{2}, \qquad t'_1 = \frac{L_1+\Delta}{2}, \qquad t'_2 = \frac{L_2-\Delta}{2},$$
$$\Delta = \tfrac{1}{2}(L_1-L_2+l_2-l_1),$$
$$j'_3 = t, \qquad j'_2 = \frac{l_1-i}{2}, \qquad j'_1 = \frac{l_2-i}{2},$$
$$m'_3 = \frac{l_1-l_2}{2}, \qquad m'_1 = j'_1 - j,$$
$$m'_2 = j - j'_2, \qquad T = j'_1+j'_2+j'_3.$$

Dans l'expression (A2.2) nous développons

$$\Phi_{t_1t_2(t\mu)}(\xi^1\xi^2)$$

et

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

sur les bases

$$\Phi_{t_1\mu_1}(\xi^1)\Phi_{t_2\mu_2}(\xi^2)$$

et

$$\overline{\Phi_{t'_1\mu'_1}(\xi'^1)}\,\overline{\Phi_{t'_2\mu'_2}(\xi'^2)}$$

(voir Bargmann (1962)), puis nous utilisons l'expression (5.5) et nous obtenons alors les coefficients

$$C^{ij}_{(N_1N_2,n_1n_2)}.$$

Il suffit alors de reporter l'expression de ces coefficients dans (5.11) pour obtenir les coefficients de Moshinsky et Smirnov sous la forme finale:

$$\begin{aligned}
&\langle N_1(\boldsymbol{R}_1)N_2(\boldsymbol{R}_2);\lambda|n_1(\boldsymbol{r}_1)n_2(\boldsymbol{r}_2);\lambda\rangle \\
&\quad=\frac{(-1)^{J_2}}{(4\pi)^2 2^{2\sigma}}[[l_1][l_2][L_1][L_2](J_1-2\lambda)!(J_2-2\lambda)!(J_1+1)!(J_2+1)!]^{1/2} \\
&\quad\times N_{n_1l_1}N_{n_2l_2}N_{N_1L_1}N_{N_2L_2} \\
&\quad\times\sum_t(2t+1)(-1)^{T-2t}[(T_1+1)!(T_2+1)!\,\Pi_{i=1}^3(T_1-2t_i)!(T_2-2t_i')!]^{1/2} \\
&\quad\times\Bigg[\sum_{ij}(-1)^m\frac{1}{i!j!}\left(\frac{(2j)!(2k)!(2l)!(2m)![j!k!l!m!]^{-1}}{(J_1-2i+1)!(J_1-2\lambda-2i)!(T_1-i+1)!(T_2-2\lambda-i)!}\right)^{1/2} \\
&\quad\times\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3\\ m_1 & m_2 & m_3\end{pmatrix}\begin{pmatrix} j_1' & j_2' & t\\ m_1' & m_2' & m_3'\end{pmatrix}(\sin\phi)^{L_1+l_1-2i}(\cos\phi)^{L_2-l_1+2(i+j)}\Bigg] \\
&\quad\times\Bigg[\sum_{\substack{\mu_1\mu_1'\\ \mu_2\mu_2'}}\begin{pmatrix} t_1 & t_2 & t\\ \mu_1 & \mu_2 & \mu\end{pmatrix}\begin{pmatrix} t_1' & t_2' & t\\ \mu_1' & \mu_2' & \mu\end{pmatrix} \\
&\quad\quad\frac{P^{(n_1',n_2')}_{(N_1',N_2')}(\phi)}{\{\Pi_{i=1}^2[(t_i+\mu_i)!(t_i-\mu_i)!(t_i'+\mu_i')!(t_i'-\mu_i')!]\}^{1/2}}\Bigg],
\end{aligned}\tag{A2.3}$$

où

$$t_1+\mu_1+N_1'=N_1,\qquad t_1'-\mu_3+n_1'=n_1,$$
$$t_2+\mu_2+N_2'=N_2,\qquad t_2'-\mu_4+n_2'=n_2.$$

L'expression ci-dessus des coefficients de Moshinsky et Smirnov ressemble à l'expression donnée par Dobeš (1977) mais les quantités entre crochets présentent de nombreuses propriétés de symétrie que n'offre pas l'expression donnée par Dobeš.

Remerciements

Je remercie Monsieur le Professeur Lambert d'avoir bien voulu m'accueillir dans son laboratoire.

Je remercie vivement le Dr Kibler qui a lu ce travail et qui m'a aidé en participant à de nombreuses discussions.

Enfin, je remercie les rapporteurs (referees) de ce travail pour leurs critiques et suggestions constructives.

Références

Baranger M et Davies K T R 1966 *Nucl. Phys.* **49** 403
Bargmann V 1962 *Rev. Mod. Phys.* **34** 319
Dobeš 1977 *J. Phys. A: Math. Gen.* **10** 2053
Edmonds A R 1957 *Angular momentum in quantum mechanics* (Princeton, NJ: Princeton University Press)
Efros V D 1973 *Nucl. Phys. A* **202** 180
Fieck G 1979 *J. Phys. B: Atom. Molec. Phys.* **12** 1063

Gal A 1968 *Ann. Phys.* **49** 30
Hage Hassan M 1980 *Thèse d'Etat (Lyon)*
Kumar K 1966a *J. Math. Phys.* **7** 671
—— 1966b *Aust. J. Phys.* **19** 719
—— 1967 *Aust. J. Phys.* **20** 205
Messiah A 1965 *Mécanique Quantique I* (Paris: Dunod)
Moshinsky M 1959 *Nucl. Phys.* **13** 104
Raynal J 1976 *Nucl. Phys. A* **259** 272
Schwinger J 1965 in *Quantum Theory of Angular Momentum* ed Biedenharn et van Dam (New-York: Academic) p 229
Smirnov Yu F 1962 *Nucl. Phys.* **39** 346
Talmi I 1952 *Helv. Phys. Acta* **25** 185
Trlifaj L 1972 *Phys. Rev. C* **5** 1534
Wong C W 1970 *Nucl. Phys. A* **147** 563
Yutsis A P et Bandzaitis A 1965 *Angular Momentum Theory in Quantum Mechanics* (Vilnius: Litovskoi SSR)