Hylleraas-Breit 变换在类氦离子 Schrödinger 方程中的应用

郑伟英

(北京大学数学科学学院　北京 100871)

The application of the Hylleraas-Breit Transformation to the Schrödinger equations of heliumlike atoms

Weiying Zheng

(*School of Mathematical Sciences, Peking University, Beijing,100871,China*)

摘 要

本文给出了 Hylleraas-Breit 变换 (HBT) 的具体形式, 并用之将类氦离子不动核问题的六维 Schrödinger 方程化为三维的形式. 给出了求解类氦离子任一能量定态问题的三维能量方程或方程组以及对应的变分形式.

Abstract

We give the explicit form of the Hylleraas-Breit Transformation in the present paper, and apply it to the fixed nuclear problems of helium-like ions. Utilizing the relation between the total angular momentum operator and the energy operator, we can transfer the six-dimensional Schrödinger equations to three-dimensional forms. For any given stationary energy state, we give the energy equation or systems of equations and its variational form in three variables r_1, r_2, θ, where r_1, r_2 are the distance between the two electrons and the nuclear and θ is the inter-electronic angle. The energy equations given by G. Breit[2] are special cases in our paper when the angular momentum number $l = 0, 1$.

Keywords: Hylleraas-Breit Transformation, Schrödinger equation, angular momentum.

关键词: Hylleraas-Breit 变换, Schrödinger 方程, 角动量.

01) 国家重点基础研究基金和高等学校博士学科点专项科研基金资助项目.

§1 引言

G. Breit 在 1930 年受 Hylleraas 坐标 (r_1, r_2, r_{12})[1] 的启发，提出了一个新的坐标变换 [2]，称为 HBT，将类氦离子六维 Schrödinger 方程的 S, P 态化为三维的形式. 在类氦离子不动核问题的求解中起到很大作用，使一种弹性力学和流体力学的数值方法 — 有限元方法 (FEM)，应用于量子三体问题的计算成为可能，并取得了很好的效果 [3–7]. 但 Breit 只是通过一系列方程来说明 HBT，未给出具体形式，并且该文推导复杂，艰涩难懂. 1964 年，A.K.Bhatia 和 A.Temkin[8] 宣称，由于 HBT 对于交换两电子的不对称性，得到 D 态以上激发态的能量方程是很困难的. 他们另外给出了一个变换，称为 Bhatia-Temkin 变换 (BTT)，由此得到了求解所有定态问题的两个方程组的通式. 但与 Breit 相同，他们也未给出 BTT 的具体形式，这给求变换的 Jacobi 矩阵带来很大困难. 并且，Bhatia 和 Temkin 没有说明，两个方程组分别适用于何种定态.

我们给出了 HBT 的具体表示形式，将波函数按角动量平方算子的本征函数系展开，得到了求解类氦离子任一能量定态的方程，并给出了对应的变分形式. 以上事实说明，HBT 是可以用于 $D, F, \cdots$ 等类氦离子激发态的. 在文章最后，我们还给出了 FEM 结合 HBT 计算氦原子能级的结果. 我们在求解氦原子三维定态能量方程时，对波函数并未强加任何物理假定 (包括波函数的对称性和反对称性)，但从解的图像可以看出，波函数的确是对称 (单态) 或反对称的 (三重态).

本文采用原子单位，即能量单位用 Rydberg，长度单位用 Bohr 半径 a_0，考虑无自旋，无相对论效应的不动核问题.

§2 Hylleraas-Breit 变换和能量方程

对于氦原子和类氦离子，其 Schrödinger 方程为：

$$-\Delta_1\psi - \Delta_2\psi + V\psi = E\psi, \tag{2.1}$$

其中 $\Delta_i\psi = \frac{\partial^2\psi}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z_i^2}$, (x_i, y_i, z_i) 为第 i 个电子在固定坐标系 $o-xyz$ 内的坐标，(r_i, θ_i, ϕ_i) 为电子 i 的球坐标表示 (假定原子核位于坐标原点)，$i = 1, 2$. $V = -\frac{2Z}{r_1} - \frac{2Z}{r_2} + \frac{1}{r_{12}}$ 为势能，Z 为原子核的电荷数，$r_{12} = \sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2\cos\theta}$ 为两电子间的距离，θ 为向径 $\vec{r_1}$ 和 $\vec{r_2}$ 的夹角. 令 $H = -\Delta_1 - \Delta_2 + V$. 角动量平方算子 M^2 的本征值方程为：

$$\{[\sum_{i=1}^{2}(y_i\frac{\partial}{\partial z_i} - z_i\frac{\partial}{\partial y_i})]^2 + [\sum_{i=1}^{2}(z_i\frac{\partial}{\partial x_i} - x_i\frac{\partial}{\partial z_i})]^2 + [\sum_{i=1}^{2}(x_i\frac{\partial}{\partial y_i} - y_i\frac{\partial}{\partial x_i})]^2 + l(l+1)\}\psi = 0, \tag{2.2}$$

其中 $l = 0, 1, \cdots$. 我们引入三个欧拉角 (θ', ϕ', ϕ)，使得 (r_1, θ', ϕ') 为电子 1 的球坐标表示，即 $\theta' = \theta_1, \phi' = \phi_1$. ϕ 为面 $r_1 - z$ 和面 $r_1 - r_2$ 的夹角. 旋转坐标系，使得 $\vec{r_1}$ 为新的 $\vec{oz'}$ 轴，且单位向量 $\vec{ox}$, $\vec{oy}$, $\vec{oz}$ 在新坐标系内的坐标分别为：$(-\cos\theta'\cos\phi', \sin\phi', \sin\theta'\cos\phi')$, $(-\cos\theta'\sin\phi'$, $-\cos\phi', \sin\theta'\sin\phi')$, $(\sin\theta', 0, \cos\theta')$；$\vec{r_2}$ 在 $o-x'y'z'$ 内的球坐标为 $(r_2, \theta, \pi+\phi)$. 以 $(r_1, r_2, \theta,$

θ', ϕ, ϕ') 为新的坐标变量，则 HBT 由下式确定:

$$\begin{cases} x_1 = r_1 \sin\theta' \cos\phi', \\ y_1 = r_1 \sin\theta' \sin\phi', \\ z_1 = r_1 \cos\theta', \\ x_2 = r_2(\sin\theta\cos\theta'\cos\phi\cos\phi' - \sin\theta\sin\phi\sin\phi' + \cos\theta\sin\theta'\cos\phi'), \\ y_2 = r_2(\sin\theta\cos\theta'\cos\phi\sin\phi' + \sin\theta\sin\phi\cos\phi' + \cos\theta\sin\theta'\sin\phi'), \\ z_2 = r_2(\cos\theta\cos\theta' - \sin\theta\sin\theta'\cos\phi). \end{cases} \tag{2.3}$$

将单位向量 $\vec{r_2}$ 和单位向量 $\vec{r_1}, \vec{oz}, \vec{oy}$ 分别作内积，可得:

$$\begin{cases} \cos\theta = \cos\theta'\cos\theta_2 + \sin\theta'\sin\theta_2\cos(\phi_2-\phi_1), \\ \cos\theta_2 = \cos\theta\cos\theta' - \sin\theta\sin\theta'\cos\phi, \\ \sin\theta\sin\phi = \sin\theta_2\sin(\phi_2-\phi_1). \end{cases} \tag{2.4}$$

利用 (2.3), 可以将 (2.1),(2.2) 变化为 (HBT 的 Jacobi 矩阵见附录):

$$L(\psi) - \frac{A_1(\psi)}{r_1^2} - \frac{A_2(\psi)}{r_2^2} = E\psi, \tag{2.5}$$

$$[\frac{\partial^2}{\partial\theta'^2} + ctg\theta'\frac{\partial}{\partial\theta'} + \frac{1}{\sin^2\theta'}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} - 2\frac{\cos\theta'}{\sin^2\theta'}\frac{\partial^2}{\partial\phi\partial\phi'} + \frac{1}{\sin^2\theta'}\frac{\partial^2}{\partial\phi'^2} + l(l+1)]\psi = 0, \tag{2.6}$$

其中

$$\begin{aligned} L(\psi) &= -\frac{1}{r_1^2}\frac{\partial}{\partial r_1}(r_1^2\frac{\partial\psi}{\partial r_1}) - \frac{1}{r_2^2}\frac{\partial}{\partial r_2}(r_2^2\frac{\partial\psi}{\partial r_2}) - (\frac{1}{r_1^2}+\frac{1}{r_2^2})\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}) + V\psi, \\ A_1(\psi) &= M^2(\psi) + 2ctg\theta B_1(\psi) + 2\frac{\partial}{\partial\theta}B_2(\psi) - 2B_3(\psi) + (ctg^2\theta - 1)\frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2}, \\ A_2(\psi) &= \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2}, \qquad B_1(\psi) = ctg\theta'\cos\phi\frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2} + \sin\phi\frac{\partial^2\psi}{\partial\phi\partial\theta'}, \\ B_2(\psi) &= ctg\theta'\sin\phi\frac{\partial\psi}{\partial\phi} - \cos\phi\frac{\partial\psi}{\partial\theta'},\ B_3(\psi) = \frac{\sin\phi}{\sin\theta'}\frac{\partial^2\psi}{\partial\theta\partial\phi'} + \frac{ctg\theta\cos\phi}{\sin\theta'}\frac{\partial^2\psi}{\partial\phi\partial\phi'}. \end{aligned}$$

因为角动量分量算子 $M_z = \sum_{i=1}^2(x_i\frac{\partial}{\partial y_i} - y_i\frac{\partial}{\partial x_i}) = \frac{\partial}{\partial\phi'}$ 和 M^2 的共同本征函数构成平方可积函数空间的一组完备基，故 (2.5) 的任一本征函数可按这组基做展开. 由于能量本征值 E 关于磁量子数 m 是简并的, 我们只需求 (2.6) 满足 $\frac{\partial\psi}{\partial\phi'} = 0$ 的所有本征函数即可. 此时得到的所有无关解为 [8]: $D_l^{k\pm}, k = 0,1,\cdots,l;\ l = 0,1,\cdots$; 其中 $D_l^{k+} = F_l^k(\theta')\sin^k\theta'\cos k\phi, D_l^{k-} = F_l^k(\theta')\sin^k\theta'\sin k\phi; F_l^k(\theta') = F(k-l, k+l+1; k+1; \sin^2\frac{\theta'}{2})$ 为超几何函数 [9]. 由 F_l^k 的表达式和超几何方程 [9], 我们可以得到:

$$\begin{cases} \dfrac{dF_l^k}{d\theta'} = C_{lk}\sin\theta' F_l^{k+1}, \\ C_{lk}\sin^2\theta' F_l^{k+1} = 2kF_l^{k-1} - 2k\cos\theta' F_l^k, \end{cases} \tag{2.7}$$

其中 $C_{lk}=\frac{(k-l)(k+l+1)}{2(k+1)}$. 利用 (2.7), 经过直接计算，可得：

$$
\begin{cases}
D_l^{0+}=F_l^0(\theta'), \quad B_2(D_l^{0+})=-C_{l0}D_l^{1+},\\
B_1(D_l^{0+})=B_3(D_l^{0+})=A_2(D_l^{0+})=0,\\
B_1(D_l^{k\pm})=\dfrac{kC_{lk}}{2}D_l^{(k+1)\pm}-k^2D_l^{(k-1)\pm}, \text{ 当}k\geq 1\text{时};\\
B_2(D_l^{k\pm})=-\dfrac{C_{lk}}{2}D_l^{(k+1)\pm}-kD_l^{(k-1)\pm}, \text{ 当}k\geq 1\text{时};\\
B_3(D_l^{k\pm})=0, \text{ 当}k\geq 1\text{时}.
\end{cases}
\tag{2.8}
$$

显然，空间 $V_l^{\pm}$=span$\{D_l^{k\pm},\ k=0,1,\cdots,l\}$ 均是算子 H 的不变子空间. 对于角量子数为 l 的任一能量定态，我们可以构造波函数为： $\psi_l^{\pm}=\sum_{k=0}^{l}u_l^{k\pm}(r_1,r_2,\theta)D_l^{k\pm}$. 将 $\psi_l^{\pm}$ 代入方程 (2.5), 注意到 $D_l^{k\pm}$ 为 (2.6) 式的解且是线性无关的，利用 (2.8), 可得：

$$
\begin{aligned}
L(u_l^{k\pm})+[&\frac{l(l+1)+k^2(ctg^2\theta-1)}{r_1^2}+\frac{k^2}{r_2^2\sin^2\theta}]u_l^{k\pm}\\
&-\frac{C_{l,k-1}(k-1)(1-\delta_{k0})ctg\theta}{r_1^2}u_l^{(k-1)\pm}+\frac{2(k+1)^2(1-\delta_{kl})ctg\theta}{r_1^2}u_l^{(k+1)\pm}\\
&+\frac{C_{l,k-1}(1-\delta_{k0})(1+\delta_{k1})}{r_1^2}\frac{\partial u_l^{(k-1)\pm}}{\partial\theta}+\frac{2(k+1)(1-\delta_{kl})}{r_1^2}\frac{\partial u_l^{(k+1)\pm}}{\partial\theta}\\
&=Eu_l^{k\pm},
\end{aligned}
\tag{2.9}
$$

其中 $\delta_{ij}=1$, 若 $i=j$; $\delta_{ij}=0$, 若 $i\neq j$.

因 $D_l^{0-}=0$, 我们取 $u_l^{0-}=0$. 对任给定的 $l\geq 0$, (2.9) 式是两个独立的方程组，一个是以 $u_l^{0+},u_l^{1+},\cdots,u_l^{l+}$ 为未知函数， $l+1$ 个方程 ((2.9) 中下标的范围取为 $k=0,1,\cdots,l$) 的方程组；另一个是以 $u_l^{1-},u_l^{2-},\cdots,u_l^{l-}$ 为未知函数， l 个方程的方程组 $(k=1,2,\cdots,l)$. 分别用于求解不同的定态问题.

令 $\mu=\cos\theta$, 对函数 $v=v(r_1,r_2,\mu)$ 定义：

$$
\|u\|^2=\int[r_1^2r_2^2(\frac{\partial u}{\partial r_1})^2+r_1^2r_2^2(\frac{\partial u}{\partial r_2})^2+(r_1^2+r_2^2)(1-\mu^2)(\frac{\partial u}{\partial\mu})^2+r_1^2r_2^2u^2]dr_1dr_2d\mu
$$

$$
U_l^+=\{(v_l^{0+},v_l^{1+},\cdots,v_l^{l+}):\sum_{k=0}^{l}\|v_l^{k+}\|^2<+\infty\},U_l^-=\{(v_l^{1-},v_l^{2-},\cdots,v_l^{l-}):\sum_{k=1}^{l}\|v_l^{k-}\|^2<+\infty\}.
$$

则对应的变分问题为：求 $(u_l^{k_0\pm},\cdots,u_l^{l\pm})\in U_l^{\pm}$, 使得

$$\begin{aligned}\sum_{k=k_0}^{l}\int\ \{\ & r_1^2r_2^2\frac{\partial u_l^{k\pm}}{\partial r_1}\frac{\partial v_l^{k\pm}}{\partial r_1}+r_1^2r_2^2\frac{\partial u_l^{k\pm}}{\partial r_2}\frac{\partial v_l^{k\pm}}{\partial r_2}+(r_1^2+r_2^2)(1-\mu^2)\frac{\partial u_l^{k\pm}}{\partial \mu}\frac{\partial v_l^{k\pm}}{\partial \mu}\\ &+[r_1^2r_2^2V+l(l+1)r_2^2+\frac{k^2r_1^2+k^2r_2^2(2\mu^2-1)}{1-\mu^2}]u_l^{k\pm}v_l^{k\pm}\\ &-\frac{C_{l,k-1}(k-1)(1-\delta_{k0})r_2^2\mu}{\sqrt{1-\mu^2}}u_l^{(k-1)\pm}v_l^{k\pm}+\frac{2(k+1)^2(1-\delta_{kl})r_2^2\mu}{\sqrt{1-\mu^2}}u_l^{(k+1)\pm}v_l^{k\pm}\\ &-2(k+1)(1-\delta_{kl})r_2^2\sqrt{1-\mu^2}\frac{\partial u_l^{(k+1)\pm}}{\partial\mu}v_l^{k\pm}\\ &-C_{l,k-1}(1-\delta_{k0})(1+\delta_{k1})r_2^2\sqrt{1-\mu^2}\frac{\partial u_l^{(k-1)\pm}}{\partial\mu}v_l^{k\pm}\}dr_1dr_2d\mu\\ &=E\sum_{k=k_0}^{l}\int u_l^{k\pm}v_l^{k\pm}r_1^2r_2^2dr_1dr_2d\mu,\quad \forall(v_l^{k_0\pm},\cdots,v_l^{l\pm})\in U_l^{\pm},\end{aligned}\tag{2.10}$$

其中 $k_0=0$, 若取“ + ”； $k_0=1$, 若取“ − ”.

§3 能级分析和应用

对方程 (2.9) 或 (2.10), 我们重点分析两个独立电子的角量子数较小的几种情况. 因为这在类氦离子基态和低激发态问题的求解中起着重要作用.

利用 Legendre 多项式的加法公式以及 Legendre 多项式与超几何函数的关系 [9], 注意到 $\vec{oz}$ 轴在 $o-x'y'z'$ 坐标系内的方位角为 0, 我们可以得到：

$$P_l(\cos\theta_1)=P_l(\cos\theta')=F(-l,l+1;1;\frac{1-\cos\theta'}{2})=D_l^{0+},\tag{3.1}$$

$$\begin{aligned}P_l(\cos\theta_2)&=P_l(\cos\theta)P_l(\cos\theta')+2\sum_{k=1}^{l}\frac{(l-k)!}{(l+k)!}P_l^k(\cos\theta)P_l^k(\cos\theta')\cos k\phi\\ &=P_l(\cos\theta)D_l^{0+}+\sum_{k=1}^{l}\frac{(-1)^k}{k!2^{k-1}}P_l^k(\cos\theta)D_l^{k+}.\end{aligned}\tag{3.2}$$

假定一个电子处于 s 态，另一个处于角量子数为 l 的态. 忽略两电子间的相互作用，则两电子波函数的角度部分由 $P_l(\cos\theta_1)$ 和 $P_l(\cos\theta_2)$ 的线性组合构成. 由 (3.1) 和 (3.2), 我们构造该态的波函数为: $\psi=\sum_{k=0}^{l}u_l^{k+}D_l^{k+}$. 因此描述该定态的方程组为 (2.9),(2.10) 中取“ + ”的一个. 当 $l=0,1$ 时, (2.9) 分别变为如下方程和方程组:

$$L(u_0^{0+})=Eu_0^{0+},\tag{3.3}$$

$$
\begin{cases}
L(u_1^{0+}) + \dfrac{2u_1^{0+}}{r_1^2} + \dfrac{2ctg\theta}{r_1^2}u_1^{1+} + \dfrac{2}{r_1^2}\dfrac{\partial u_1^{1+}}{\partial\theta} = Eu_1^{0+}, \\
L(u_1^{1+}) + (\dfrac{1}{r_1^2} + \dfrac{1}{r_1^2})\dfrac{u_1^{1+}}{\sin^2\theta} - \dfrac{2}{r_1^2}\dfrac{\partial u_1^{0+}}{\partial\theta} = Eu_1^{1+},
\end{cases} \tag{3.4}
$$

$$
L(u_1^{1-}) + (\frac{1}{r_1^2} + \frac{1}{r_1^2})\frac{u_1^{1-}}{\sin^2\theta} = Eu_1^{1-} \tag{3.5}
$$

上述三式即是 G.Breit[2] 给出的三个方程.

对于 U_l^- 中的函数，我们不妨只考虑 $l = 1, 2$ 的情况，其它态可以类似考虑. 因为

$$
P_1^1(\cos\theta_1)P_1^1(\cos\theta_2)\sin(\phi_2 - \phi_1) = \sin\theta_1\sin\theta_2\sin(\phi_2 - \phi_1) = \sin\theta D_1^{1-}, \tag{3.6}
$$

$$
\begin{aligned}
u_1P_2^1(\cos\theta_1)\ & P_1^1(\cos\theta_2)\sin(\phi_2 - \phi_1) - u_2P_1^1(\cos\theta_1)P_2^1(\cos\theta_2)\sin(\phi_2 - \phi_1) \\
&= (u_1\cos\theta_1 - u_2\cos\theta_2)\sin\theta\sin\theta'\sin\phi \\
&= (u_1 - u_2\cos\theta)\sin\theta D_2^{1-} + \frac{1}{2}u_2\sin 2\theta\sin\theta D_2^{2-}.
\end{aligned} \tag{3.7}
$$

所以，(3.4) 代表两个 p 电子生成的 P 态氦原子；(3.5) 代表一个 p 电子和一个 d 电子生成的 D 态氦原子. 由此可以看出，当 $l = 1, 2$ 时，描述这两种态的方程是 (2.9) 取 " − " 的情况. 同样，我们也可以分析其他能量定态的情况，它们的能量分别对应 (2.9) 或 (2.10) 的不同本征值. 特别值得强调的是，如前所述，描述基态或低激发态 $1snt$, $n = 1, 2, \cdots$; $t = s, p, d, \cdots$ 的方程是 (2.9) 或 (2.10) 中取 " + " 的方程.

我们用有限元方法求解方程 (3.3) 和 (3.4)(祥见 [7]), 并未强加任何的物理假定，包括波函数的对称性和反对称性. 得到的误差为 $10^{-8} - 10^{-7}a.u.$. 这比已有的相应有限元结果要好. 从解的图像可以看出，波函数的确是对称 (单态) 或反对称的 (三重态)；并且，当 $r_1, r_2 \to 0$ 时，波函数迅速趋于零. 这说明，虽然 Hylleraas-Breit 变换和有限元方法在简化和求解微分方程 (2.1) 的过程中并未强加物理假定，但得到的解能反映出问题的很多内在物理性质.

氦原子的有限元结果 ($a.u.$).

state	$1s1s\ ^1S$	$1s2s\ ^1S$	$1s2s\ ^3S$	$1s2p\ ^3P$
exp.	-2.903724377	-2.1459740457	-2.17522937824	-2.13316419078
FEM[7]	-2.903724106	-2.1459740042	-2.1752293277	-2.1331633824
FEM[3]	-2.90326			
FEM[4]	-2.9036118	-2.145960	-2.1752214	
FEM[5]	-2.90324			

致谢: 本文的完成得到导师应隆安教授和吉林大学原子分子研究所丁培柱教授的有益建议和讨论，特此致以衷心的感谢谢！

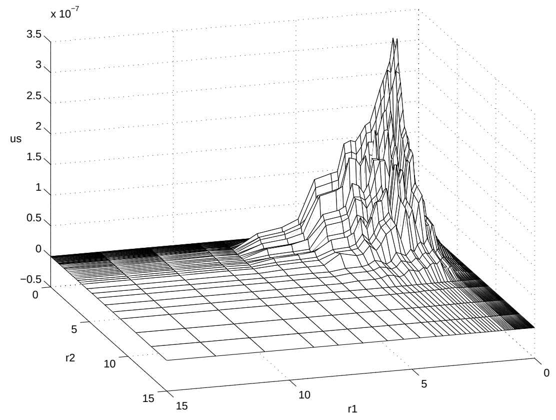

图 1: $1s1s\ ^1S$ 态波函数.

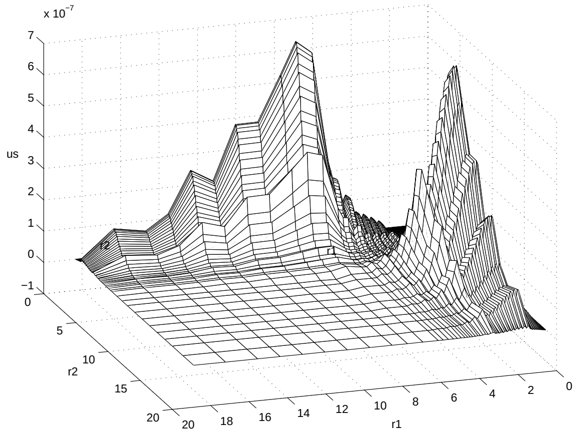

图 2: $1s2s\ ^1S$ 态波函数.

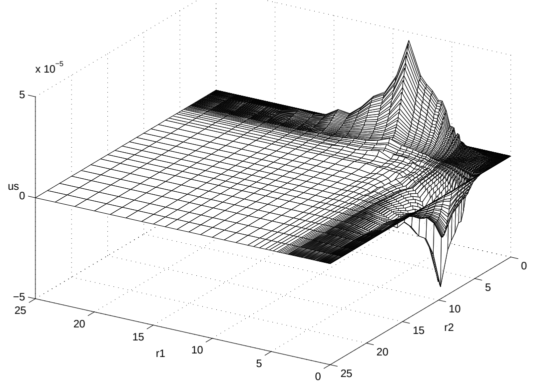

图 3: $1s2s\ ^3S$ 态波函数.

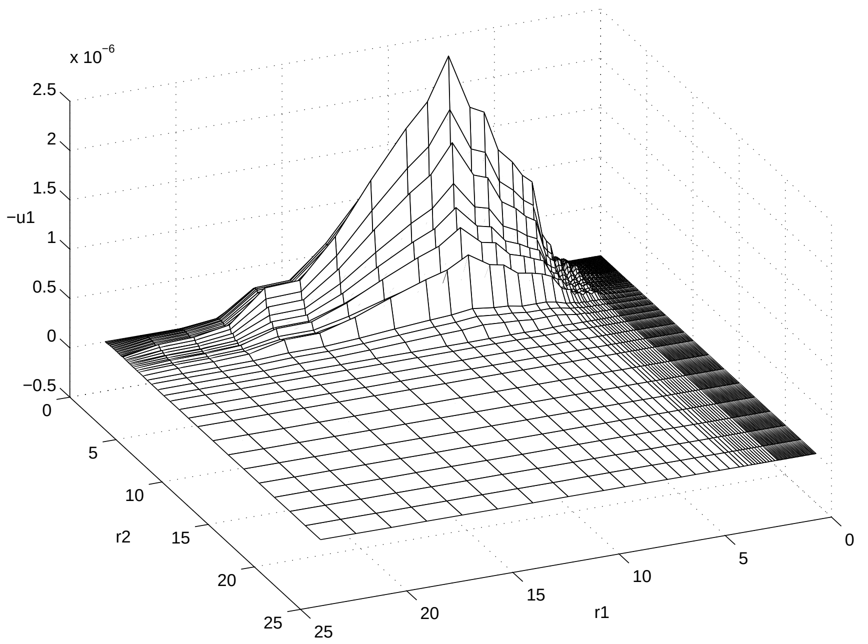

图 4: $1s2p\ ^3P$ 态径向波函数 u_1.

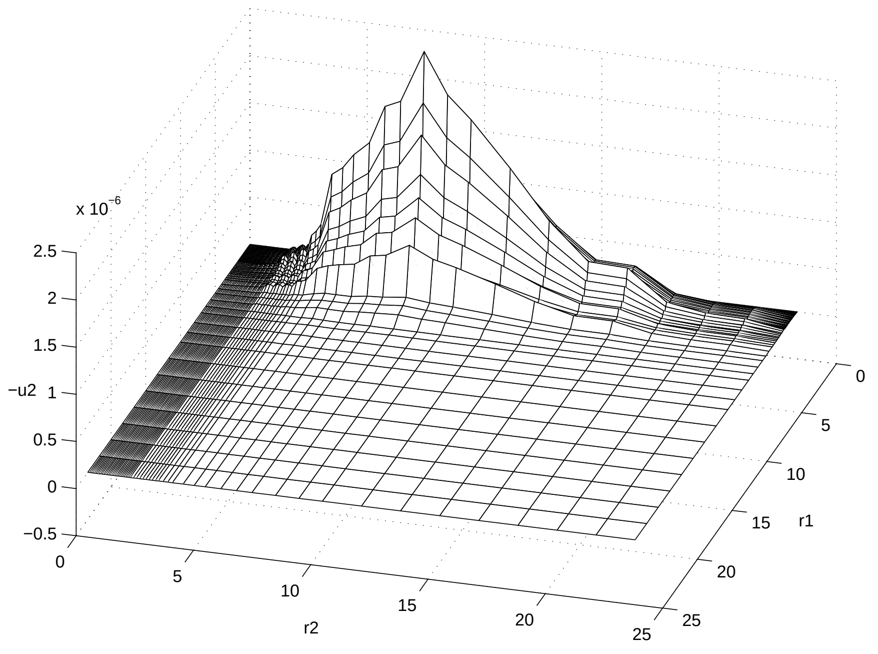

图 5: $1s2p\ ^3P$ 态径向波函数 u_2.

参 考 文 献

[1] E.A.Hylleraas, Z.Physik 48, 469(1928); 54, 347(1929).

[2] G.Breit, Phys.Rev. 35, 569(1930).

[3] F.S.Levin, J.Shertzer, Phys.Rev.A 32, 3285(1985).

[4] M. Braun, W.Schweizer and H,Herod, Phys.Rev.A 48, 1916(1993).

[5] A.Scrinzi, Comp.Phys.Comm. 86, 67(1995).

[6] J.Ackeman, Phys.Rev.A 52, 1968(1995).

[7] W.Zheng and L.Ying, "*Finite element calculation for helium atom*", Rearch Report, School of Mathematical Sciences and institute of Mathematics, Peking University, 69, 2001;

[8] A.K.Bhatia, A.Temkin, Rev.Mod.Phys. 36, 1050(1964).

[9] 王竹溪，郭敦仁，特殊函数概论，北京大学出版社 (2000).

附 录

HBT 的 Jacobi 矩阵和 Jacobi 行列式:

在本文第二节 (2.5) 和 (2.6) 式的推导以及其它一些求导计算中， HBT 的 Jacobi 矩阵起着重要的作用. 矩阵 $J = \dfrac{\partial(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2)}{\partial(r_1, \theta', \phi', r_2, \theta, \phi)}$ 由 (2.3) 可以直接得到. 我们这里不再赘述. 但求 $J^{-1} = \dfrac{\partial(r_1, \theta', \phi', r_2, \theta, \phi)}{\partial(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2)}$ 是相当复杂的. 我们这里给出具体表达式, Jacobi 行列式为: $\det(J) = r_1^2 r_2^2 \sin\theta \sin\theta'$;

J^{-1} 的元素为：

$$
\begin{cases}
\dfrac{\partial r_1}{\partial x_1} = \sin\theta'\cos\phi', \quad \dfrac{\partial \theta'}{\partial x_1} = \dfrac{1}{r_1}\cos\theta'\cos\phi', \quad \dfrac{\partial \phi'}{\partial x_1} = -\dfrac{\sin\phi'}{r_1\sin\theta'}, \\
\dfrac{\partial r_2}{\partial x_1} = 0, \quad \dfrac{\partial \theta}{\partial x_1} = \dfrac{1}{r_1}(\sin\phi'\sin\phi - \cos\theta'\cos\phi\cos\phi'), \\
\dfrac{\partial \phi}{\partial x_1} = \dfrac{1}{r_1\sin\theta\sin\theta'}(\cos\theta\sin\theta'\cos\phi\sin\phi' + \cos\theta\sin\theta'\cos\theta'\sin\phi\cos\phi' + \sin\theta\cos\theta'\sin\phi'), \\
\dfrac{\partial r_1}{\partial y_1} = \sin\theta'\sin\phi', \quad \dfrac{\partial \theta'}{\partial y_1} = \dfrac{1}{r_1}\cos\theta'\sin\phi', \quad \dfrac{\partial \phi'}{\partial y_1} = \dfrac{\cos\phi'}{r_1\sin\theta'}, \\
\dfrac{\partial r_2}{\partial y_1} = 0, \quad \dfrac{\partial \theta}{\partial y_1} = -\dfrac{1}{r_1}(\cos\theta'\cos\phi\sin\phi' + \cos\phi'\sin\phi), \\
\dfrac{\partial \phi}{\partial y_1} = \dfrac{1}{r_1\sin\theta\sin\theta'}(-\cos\theta\sin\theta'\cos\phi\cos\phi' + \cos\theta\sin\theta'\cos\theta'\sin\phi\sin\phi' - \sin\theta\cos\theta'\cos\phi'), \\
\dfrac{\partial r_1}{\partial z_1} = \cos\theta', \quad \dfrac{\partial \theta'}{\partial z_1} = -\dfrac{\sin\theta'}{r_1}, \quad \dfrac{\partial \theta}{\partial z_1} = \dfrac{\sin\theta'\cos\phi}{r_1}, \quad \dfrac{\partial \phi}{\partial z_1} = -\dfrac{\cos\theta\sin\theta'\sin\phi}{r_1\sin\theta}, \quad \dfrac{\partial \phi'}{\partial z_1} = \dfrac{\partial r_2}{\partial z_1} = 0, \\
\dfrac{\partial r_1}{\partial x_2} = \dfrac{\partial \theta'}{\partial x_2} = \dfrac{\partial \phi'}{\partial x_2} = 0, \quad \dfrac{\partial r_2}{\partial x_2} = \sin\theta\cos\theta'\cos\phi\cos\phi' - \sin\theta\sin\phi\sin\phi' + \cos\theta\sin\theta'\cos\phi', \\
\dfrac{\partial \theta}{\partial x_2} = \dfrac{1}{r_2}(-\sin\theta\sin\theta'\cos\phi' - \cos\theta\sin\phi\sin\phi' + \cos\theta\cos\theta'\cos\phi\cos\phi'), \\
\dfrac{\partial \phi}{\partial x_2} = -\dfrac{1}{r_2\sin\theta}(\cos\theta'\sin\phi\cos\phi' + \cos\phi\sin\phi'), \\
\dfrac{\partial r_1}{\partial y_2} = \dfrac{\partial \theta'}{\partial y_2} = \dfrac{\partial \phi'}{\partial y_2} = 0, \quad \dfrac{\partial r_2}{\partial y_2} = \sin\theta\cos\theta'\cos\phi\sin\phi' + \sin\theta\sin\phi\cos\phi' + \cos\theta\sin\theta'\sin\phi', \\
\dfrac{\partial \theta}{\partial y_2} = \dfrac{1}{r_2}(-\sin\theta\sin\theta'\sin\phi' + \cos\theta\sin\phi\cos\phi' + \cos\theta\cos\theta'\cos\phi\sin\phi'), \\
\dfrac{\partial \phi}{\partial y_2} = \dfrac{1}{r_2\sin\theta}(\cos\phi\cos\phi' - \cos\theta'\sin\phi\sin\phi'), \\
\dfrac{\partial r_1}{\partial z_2} = \dfrac{\partial \theta'}{\partial z_2} = \dfrac{\partial \phi'}{\partial z_2} = 0, \quad \dfrac{\partial r_2}{\partial z_2} = \cos\theta\cos\theta' - \sin\theta\sin\theta'\cos\phi, \\
\dfrac{\partial \theta}{\partial z_2} = -\dfrac{1}{r_2}(\sin\theta\cos\theta' + \cos\theta\sin\theta'\cos\phi), \quad \dfrac{\partial \phi}{\partial z_2} = \dfrac{\sin\theta'\sin\phi}{r_2\sin\theta}.
\end{cases}
$$