CNKI: 50-1165/N. 20110917. 1359. 013

新环状势的狄拉克与薛定谔方程束缚态解*

李维全，胡先权

(重庆师范大学 物理与电子工程学院，重庆 400047)

摘要：本文提出了一种新的环状非球谐振子势 $V(r,\theta)=\frac{K}{2}r^2+\frac{A}{r^2}+\frac{\beta}{r^2\sin^2\theta}+\frac{\gamma\cos^2\theta}{r^2\sin^2\theta}$。在标量势与矢量势相等的条件下,给出了 Dirac 方程和薛定谔方程的束缚态波函数解 $u(\beta' r)=\frac{1}{\Gamma(L+3/2)}\sqrt{\frac{2\beta'\cdot\Gamma(n_r+L+3/2)}{n_r\,!}}\cdot(\beta' r)^{L+1}\cdot e^{-\frac{(\beta' r)2}{2}}\cdot F(-n_r,L+3/2(\beta' r)^2)$。通过分离变量法得到相应的角向波函数方程和径向波函数方程,得出用广义连带勒让德多项式表示的归一化角向波函数和用合流超几何函数表示的归一化径向波函数 $\rho\frac{d^2F(\rho)}{d\rho^2}+(2s+\frac{1}{2}-\rho)\cdot\frac{dF(\rho)}{d\rho}-(\frac{E}{2}-s-\frac{1}{4})F(\rho)=0$,进而由径向波函数满足的束缚态边界条件获得精确的束缚态能谱方程 $E_n=\frac{1}{2}+2n+2s=2n+L+\frac{3}{2}$。

关键词：环状非球谐振子势;Dirac 方程;薛定谔方程;束缚态;广义连带勒让德多项式

中图分类号：O562.1;O413.1　　**文献标志码**：A　　**文章编号**：1672-6693(2011)05-0058-05

在强耦合条件下,势场中的运动粒子的相对论效应变得十分重要。在考虑到相对论效应时,处于势场中的运动粒子需要用 Klein-Gordon 方程或 Dirac 方程描述[1-2]。在以前的研究中,人们在标量势等于或大于矢量势的条件下给出了不少典型势函数的 Klein-Gordon 方程或 Dirac 方程的束缚态解[3-17]。这些势函数是在研究复杂的多电子原子、多原子分子的转动-振动能级结构,环状分子之间的相互作用,变形核子之间的相互作用,量子流体系统的相关态,量子点共振隧穿中能带结构等相对论问题而发展起来的相互作用势模型,其中绝大多数为非中心势。

球谐振子模型是非相对论量子力学中可精确解的模型,环状分子势属于非中心势,它们由球谐振子势和其他形式的附加势构成。这类势函数能够用来描述环状分子(如苯分子)的模型及变形核子之间的相互作用,在量子化学及核物理研究中有不少的应用。近年来,微观粒子在非球谐振子势场中的相对论效应引起了物理学界的广泛兴趣,并已取得一些有意义的结果。这些研究包括了典型环形非球谐振子势,新环形库伦势,库伦势加新环形势,谐振子势加上负 2 次幂函数构成的混合势,Hartmann 势加新环形势等。这些势函数的特点为库伦势加上 1 项或者 2 项非中心势,通过分离变量法与特殊函数论进行求解。

而本文提出一种新环状非球谐振子势,它是在球谐振子势与负 2 次幂函数叠加的基础上再叠加 2 项非中心势,共计 4 项势函数,其表达式为

$$V(r,\theta)=\frac{K}{2}r^2+\frac{A}{r^2}+\frac{\beta}{r^2\sin^2\theta}+\frac{\gamma\cos^2\theta}{r^2\sin^2\theta}\tag{1}$$

式中,K,A,β,γ,是无量纲的实参数。本文考虑相对论效应在标量势与矢量势相等的条件下,通过分离变量法与特殊函数论进行求解,获得了给出(1)式的 Dirac 方程束缚态解。

* 收稿日期:2010-12-06　修回日期:2011-06-29　网络出版时间:2011-09-17 13:59:00

资助项目:国家自然科学基金(No. 10575140013)

作者简介:李维全,男,硕士研究生,研究方向为量子物理;通讯作者:胡先权,E-mail:huxquan2003@yahoo.com.cn

网络出版地址:http://www.cnki.net/kcms/detail/50.1165.N.20110917.1359.201105.58_013.html

1 Dirac 方程的 s 波束缚态解

具有标量势 $S(r)$ 和矢量势 $V(r)$ 相等的束缚态 Dirac 方程由下式[18] 给出($\hbar = c = 1$)

$$[p^2 + 2(E+M)V(r)]\phi(r) = (E^2 - M^2)\phi(r) \tag{2}$$

其中 E 和 M 分别是粒子的总能量和静质量，p 表示动量算符。将(1) 式代入(2) 式得

$$\left(p^2 + 2(E+M)\left(\frac{K}{2}r^2 + \frac{A}{r^2} + \frac{\beta}{r^2\sin^2\theta} + \frac{\gamma\cos^2\theta}{r^2\sin^2\theta}\right)\right)\phi(r) = (E^2 - M^2)\phi(r) \tag{3}$$

在球坐标系中分离变量，令

$$\phi(r) = \phi(r,\theta,\varphi) = \frac{u(r)}{r}H(\theta)\Phi(\varphi) \tag{4}$$

把(4) 式代入(3) 式得角向波函数和径向波函数所满足的微分方程为

$$\frac{\mathrm{d}^2\Phi(\varphi)}{\mathrm{d}\varphi^2} + m^2\Phi(\varphi) = 0 \tag{5}$$

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\left(\sin\theta\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}H(\theta)\right) + \left(\lambda - \frac{2(E+M)\gamma\cos^2\theta + m^2 + 2(E+M)\beta}{\sin^2\theta}\right)H(\theta) = 0 \tag{6}$$

$$\frac{\mathrm{d}^2u(r)}{\mathrm{d}r^2} - \left(2(E+M)]\left(\frac{K}{r^2} + \frac{A}{r^2}\right) + \frac{\lambda}{r^2} - (E^2 - M^2)\right)u(r) = 0 \tag{7}$$

式中 λ，m^2 是分离变量过程中引入的待定常数。对于束缚态，方程(5) 的 Φ 具有周期性的自然边界条件 $\Phi(\varphi + 2\pi)$，其解为 $\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}$，$m = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots$ 对(6) 式作变量代换 $x = \cos\theta$，则(6) 式可化为

$$(1-x^2)\frac{\mathrm{d}^2H(x)}{\mathrm{d}x^2} - 2x\frac{\mathrm{d}H(x)}{\mathrm{d}x} + \left(\lambda + 2(E+M)\gamma - \frac{2(E+M)\gamma + m^2 + 2(E+M)\beta}{(1-X^2)}\right)H(x) = 0 \tag{8}$$

(8) 式可看作广义的连带勒让德微分方程，借助波函数的标准条件对特殊函数 $H(x)$ 的要求，可求出 $H(x)$ 的严格解。(8) 式的 H 满足的条件是 $H(0)$ 和 $H(\pi)$ 均为有限值，特别是 $H(\pi)$ 为有限值要求本征常数 $l(l+1)$ 中的 $l = 0,1,2,3,\cdots$ 令

$$m' = \sqrt{2(M+E)\gamma + 2(M+E)\beta} \tag{9}$$

$$l'(l'+1) = l(l+1) + 2(M+E)\gamma \tag{10}$$

则(8) 式可化为

$$(1-x^2)\frac{\mathrm{d}^2H(x)}{\mathrm{d}x^2} - 2x\frac{\mathrm{d}^2H(x)}{\mathrm{d}x} + \left(l'(l'+1) - \frac{m'^2}{(1-x^2)}\right)H(x) = 0 \tag{11}$$

(11) 式为广义的连带勒让德微分方程，其解为广义的连带勒让德函数

$$p_{l'}^{m'}(x) = \frac{1}{\Gamma(1+m')}\left(\frac{1+x}{1-x}\right)^{\frac{m'}{2}}F\left(-l', l'+1, 1+m', \frac{1-x}{2}\right) \tag{12}$$

这里要求 $m' > 0$，l' 可取任意值。为了保证在 $x = \pm 1$ 时解的有限性，l' 和 m' 必须满足条件 $l' - m' = s$，$s = 0, 1, 2, \cdots$ 故最后得到 θ 方向满足归一化的波函数为

$$H_{l'm'}(\theta) = A_{l'm'}(\sin\theta)^{m'}\sum_{k=0}^{[\frac{l'-m'}{2}]} \times \frac{(-1)^k\Gamma(2l'-2k+1)}{2^{l'}k!(l'-m'-2k)!\Gamma(l'-k+1)}(\cos\theta)^{l'-m'-2k} \tag{13}$$

其中归一化常数 $A_{l'm'} = \sqrt{\frac{2l'+1}{2}\cdot\frac{(l'-m')!}{\Gamma(l'+m'+1)}}$，由归一化条件 $\int_0^\pi H^2(\theta)\sin\theta\mathrm{d}\theta = 1$ 给出。

(7) 式进一步简化得

$$\frac{\mathrm{d}^2u(r)}{\mathrm{d}r^2} - \left((E+M)Kr^2 + \frac{l(l+1) + 2(E+M)A}{r^2} - (E^2 - M^2)\right)u(r) = 0 \tag{14}$$

令
$$\alpha(E-M)\sqrt{\frac{(E+M)}{K}},\beta'=\sqrt[4]{(E+M)K}$$
$$L(L+1)=2(E+M)A+l(l+1) \tag{15}$$
并作变量代换 $\rho=\beta' r$,(15)式代入(13)式,则(14)式化为
$$\frac{d^2u(\rho)}{d\rho^2}+[\alpha-\rho^2-\frac{L(L+1)}{\rho^2}]u(\rho)=0 \tag{16}$$

考虑方程在 $r\to 0$ 和 $r\to\infty$ 的渐进性质,作函数变换 $u(\rho)=\rho^{L+1}e^{-\frac{\rho^2}{2}}f(\rho)$,得
$$\frac{d^2f}{d\rho^2}+2(-\rho-\frac{L+1}{\rho})\frac{df}{d\rho}+(\alpha-2L-3)=0 \tag{17}$$
令 $\xi=\rho^2$,则(16)式化为
$$\xi\frac{d^2f}{d\xi^2}+(L+\frac{3}{2}-\xi)\frac{df}{d\xi}-\frac{1}{4}(2L+3-\alpha)f=0 \tag{18}$$
上式为合流超几何方程,其解可用合流超几何函数表示为
$$f(\xi)=F\left(\frac{2L+3-\alpha}{4},L+\frac{3}{2},\xi\right) \tag{19}$$

体系束缚态的边界条件满足 $u(\xi\to\alpha)\to$ 有限,则合流超几何函数中断为有限项的合流超几何级数,即
$$\frac{2L+3-\alpha}{4}=-n_r,n_r=0,1,2,\cdots \tag{20}$$
式中 n_r 为径向量子数。将(15)式代入(20)式得
$$(E-M)\sqrt{E+M}=2\sqrt{K}(2n_r+L+\frac{3}{2}) \tag{21}$$
式中
$$L=-\frac{1}{2}+\sqrt{2(E+M)A+(l+\frac{1}{2})^2} \tag{22}$$

由(9)~(12)式可知,与 λ 等价的待定常数 l 满足
$$l=-\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\sqrt{l+4l'(l'+1)-8(E+M)\gamma}=-\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\sqrt{1+4(s+m')(s+m'+1)-8(E+M)\gamma} \tag{23}$$
于是能谱方程为
$$(E-M)\sqrt{E+M}=2K(n_r+1+\sqrt{2(E+M)A+(l+\frac{1}{2})^2} \tag{24}$$
则体系相应的束缚态径向波函数为
$$u(\rho)=N_{nL}\rho^{L+1}e^{-\frac{\rho^2}{2}}F(-n_r,L+\frac{3}{2},\rho^2) \tag{25}$$

考虑合流超几何函数和广义拉盖尔函数的关系及广义拉盖尔函数间的正交关系
$$F(-n_r,\mu+1,z)=\frac{-n_r!\Gamma(\mu+1)}{\Gamma(n_r+\mu+1)}L_{n_r}^{\mu}(z) \tag{26}$$
$$\int_0^\infty z^\mu e^{-z}L_{n_r}^{\mu}(z)L_{n'_r}^{\mu}(z)dz=\frac{\Gamma(n_r+\mu+1)}{n_r!}\delta_{n_rn'_r} \tag{27}$$
故在标量势等于矢量势的条件下,Dirdc 方程的束缚态径向波函数为
$$u(\beta' r)=\frac{1}{\Gamma(L+3/2)}\sqrt{\frac{2\beta'\cdot\Gamma(n_r+L+3/2)}{n_r!}}\cdot(\beta' r)^{L+1}\cdot e^{-\frac{(\beta' r)2}{2}}\cdot F(-n_r,L+3/2(\beta' r)^2) \tag{28}$$
其中,归一化常数 $N_{n_r\cdot L}=\frac{1}{\Gamma(L+3/2)}\sqrt{\frac{2\beta'\Gamma(n_r+L+3/2)}{n_r!}}$ 由归一化条件 $\int_0^\infty u^2(\rho)dr=1$ 给出。

2 Schrödinger 方程的定态解与能级

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r^2}\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)+V(r,\theta)-E\right)\phi(r)=0 \tag{29}$$

$$V(r,\theta)=\frac{K}{2}r^2+\frac{A}{r^2}+\frac{\beta}{r^2\sin^2\theta}+\frac{\gamma\cos^2\theta}{r^2\sin^2\theta} \tag{30}$$

令$\hbar=\omega=\mu=1$,并且分离变量

$$\phi(r)=\phi(r,\theta,\varphi)=\frac{R(r)}{r}\Theta(\theta)\Phi(\varphi) \tag{31}$$

将(31)式代入(29)式,得角向波函数和径向波函数所满足的微分方程为

$$\frac{d^2\Phi(\varphi)}{d\varphi^2}+m^2\Phi(\varphi)=0 \tag{32}$$

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d}{d\theta}\Theta(\theta)\right)+\left(\lambda-\frac{\beta+\gamma\cos^2\theta+m^2}{\sin^2\theta}\right)\Theta(\theta)=0 \tag{33}$$

$$\frac{d^2R(r)}{dr^2}+\left(2E-Kr^2-\frac{2A+\lambda}{r^2}\right)R(r)=0 \tag{34}$$

式中 λ,m^2 是分离变量过程中引入的待定常数,对于束缚态,方程(32)的 Φ 具有周期性的自然边界条件 $\Phi(\varphi+2\pi)$,它的解为

$$\Phi_m(\varphi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi},m=0,\pm1,\pm2,\cdots \tag{35}$$

对(33)式作变量代换 $x=\cos\theta$,则可化为

$$(1-x^2)\frac{d^2\Theta\theta(x)}{dx^2}-2x\frac{d\Theta(x)}{dx}+\left(\lambda+\gamma-\frac{\beta+\gamma+m^2}{(1-x^2)}\right)\Theta(x)=0 \tag{36}$$

设

$$m'=\sqrt{\beta+\gamma+m^2},\lambda+\gamma=l'(l'+1) \tag{37}$$

则角向波函数为

$$(1-x^2)\frac{d^2\Theta(x)}{dx^2}-2x\frac{d\Theta(x)}{dx}+(l'(l'+1)-\frac{(m')^2}{1-x^2}\Theta(x)=0 \tag{38}$$

(38)式与(11)式形式相同,其解为广义连带勒让德多项式。(34)式进一步化简得

$$\frac{d^2R(r)}{dr^2}+\left(2E-Kr^2-\frac{2A+l'(l'+1)-\gamma}{r^2}\right)R(r)=0 \tag{39}$$

其中

$$l'=m'+k,k=0,1,2,\cdots \tag{40}$$

将(37)式和(40)式代入(39)式,得到

$$\frac{d^2R(r)}{dr^2}+\left(2E-r^2-\frac{L(L+1)}{r^2}\right)R(r)=0 \tag{41}$$

其中

$$L=\frac{1}{2}(\sqrt{1+4(\alpha-\beta+(\sqrt{\beta+m^2}+k)(\sqrt{\beta+m^2}+k+1))}-1) \tag{42}$$

定义$\rho=r^2$,由(41)式得

$$\frac{d^2R(\rho)}{d\rho^2}+\frac{1}{2\rho}\frac{dR(\rho)}{d\rho}-\left(\frac{1}{4}+\frac{L(L+1)}{4\rho^2}-\frac{E}{2\rho}\right)R(\rho)=0 \tag{43}$$

设 $R(\rho)=\rho^s e^{-\frac{\rho}{2}}F(\rho)$,将 $s=\frac{L+1}{2}$ 代入到(43)式,得到径向波函数为

$$\rho\frac{d^2F(\rho)}{d\rho^2}+\left(2s+\frac{1}{2}-\rho\right)\frac{dF(\rho)}{d\rho}-\left(\frac{E}{2}-s-\frac{1}{4}\right)F(\rho)=0 \tag{44}$$

上式的解为合流超几何函数 $F\left(s-\frac{E}{2}+\frac{1}{4},s+\frac{1}{2},\rho\right)$,从而获得本征函数

$$R(\rho)=N\rho^{s}e^{-\frac{\rho}{2}}F\left(s-\frac{E}{2}+\frac{1}{4},\frac{2s+1}{2},\rho\right) \tag{45}$$

由于解的有限性要求,获得量子化条件 $s-\frac{E}{2}+\frac{1}{4}=-n$,于是有

$$E_{n}=\frac{1}{2}+2n+2s=2n+L+\frac{3}{2},N=0,1,2,\cdots \tag{46}$$

3 小结

文章在新的环状非球谐振子势在标量势与矢量势相等的条件下,给出 Dirac 方程和薛定谔方程的束缚态解。通过分离变量得到 Dirac 方程和薛定谔方程相应的角向方程和径向方程,得出了用广义连带勒让德多项式表示的归一化角向波函数和用合流超几何函数表示的归一化径向波函数,获得了精确的束缚态能谱方程。当 $\beta+\gamma=0$,即 $\gamma=-\beta$ 时,非中心势简化为中心势,此时 $m'=\pm m=0,\pm 1,\pm 2,\cdots,l'=s+m'=0,1,2,\cdots$ 体系的轨道角动量量子数 l' 和轨道角动量磁量子数 m' 均为整数。并且以 θ 为变量的 Dirac 角向波函数可转化为标准的连带勒让德函数,以 θ 和 φ 为变量的 Dirac 角向波函数转化为标准的球谐函数,符合中心势对角向波函数的基本要求。当考虑环形势效应,即 $\beta+\gamma\neq 0$,则由(9)式和(10)式得 l' 和 m' 是非整数,但 l' 与 m' 之差为整数,这时以 θ 为变量的 Dirac 角向波函数须用广义连带勒让德多项式表示。另外不难验证,在相应参数取零时薛定谔的束缚态解也可退化为普通谐振子解。

参考文献:

[1] Wang I C, Wong C Y. Finite-size effect in the schwinger particle-production mechanism [J]. Phys Rev, 1988, D38 (1): 348-350.

[2] Talukdar B, Yunus A, Amin M R. Continuum states of the klein-Gordon equation for vector and scalar interactions [J]. Phys let, 1989, A141(7): 326-328.

[3] Cooper F, Khare A, Sukhatme U. Supersymmetric and quantum mechanics [J]. Phys rep, 1995, 251: 267-270.

[4] 郭建友,徐强,韩建超. 相对论情况下赝自旋对称性势场中运动粒子的束缚态[J]. 原子与分子物理学报,2007,24: 188-192.

[5] 侯春风,李炎,周忠祥. 具有 Morse 型标量势与矢量势的 Klein-Gordon 方程和 Dirac 方程的束缚态[J]. 物理学报,1999,48(11): 1999-2003.

[6] 胡先权,王邦美,崔立鹏. 新环状非球谐振子的 Dirac 方程束缚态解[J]. 原子与分子物理学报,2009,26: 429-432.

[7] 王邦美,胡先权. 非球谐振子势的 Schrödinger 方程的解析解[J]. 重庆师范大学学报:自然科学版,2008,25: 62-66.

[8] 张民仓,王振邦. 一类环状非球谐振子势场中相对论例子的束缚态解[J]. 物理学报,2007,56: 3688-3692.

[9] 陆法林,陈昌远. 环形非球谐振子势 Klein-Gordon 方程的束缚态[J]. 物理学报,2004,53(3): 1652-1656.

[10] 陈刚. Wood-Saxon 势中相对论粒子的束缚态[J]. 原子与分子物理学报,2003,20: 456-460.

[11] 陈昌远,孙东升,陆法林. 库仑势加新环形势的相对论束缚态[J]. 物理学报,2006,55: 3875-3879.

[12] 李宁,鞠国兴,任中州. 一类相对性非球谐振子系统的束缚态[J]. 物理学报,2005,54: 2520-2523.

[13] 魏赟赟. 带无界势的阻尼非线性 Schrdinger 方程的整体存在性[J]. 四川师范大学学报:自然科学版,2010,33(4): 450-453.

[14] 陈刚. 具有 Pöschl-Teller 型标量势与矢量势的 Klein-Gordon 方程和 Dirac 方程的束缚态[J]. 物理学报,2001,50(9): 1651-1653.

[15] 曾谨言. 量子力学(卷Ⅱ)第三版[M]. 北京:科学出版社,2000.

[16] 陈子栋. N 维各向同性谐振子 Schrödinger 束缚态解及二类递推关系[J]. 江西师范大学学报:自然科学版,2005,29(2): 109-112.

[17] 杨红. 一类带调和势的非线性 Schrdinger 方程解的不稳定性[J]. 重庆理工大学学报:自然科学版,2005,19(8): 79-82.

[18] 张民仓,王振邦. Makarov 势的 Dirac 方程的束缚态解[J]. 物理学报,2006,55: 6229-6233.

(下转第 67 页)

(上接第 62 页)

Bound States Solution of Dirac Equation and Schrödinger Equation for a New Ring Potential

LI Wei-quan, HU Xian-quan

(College of Physics and Electronic Enginering, Chongqing Normal University, Chongqing 400047, China)

Abstract: Under strong coupling conditions, the non-relativistic motion of particles and spin zero or half-integer the nature of relativistic particles in the system with the Schrödinger equation and Dirac equation can respectively describe. A new ring-shaped harmonic oscillator potential is proposed in this paper. The exact bound solution of Dirac equation and Schrödinger equation for the above potential is obtained under the condition of equal scalar potentials and vector potentials. They can be separated into an corresponding to the wave function equations of angular and radial wave function equation with the method of separation variables. The normalized angle wave function and radial wave function were expressed respectively in terms of the generalized associated-Legendre function and the confluent hyper-geometric function are presented, that the normalized radial wave function, and then by the radial bound state wave function are satisfied with the boundary conditions, obtains the exact bound state energy spectrum equations. The exact energy spectrum equations are obtained and meanwhile, proper discussion and some important conclusions are presented.

Key words: ring-shaped potential; Dirac equation; Schrödinger equation; bound state; the universal associated-Legendre function

(责任编辑 欧红叶)