2010年7月 重庆师范大学学报(自然科学版) Jul. 2010
第27卷 第4期 Journal of Chongqing Normal University(Natural Science) Vol. 27 No. 4

DOI:10.3969/J.ISSN.1672-6693.2010.04.012

新环状势的 Klein-Gordon 方程束缚态解*

闫秀明,胡先权

(重庆师范大学 物理学与电子工程学院,重庆 400047)

摘要:Klein-Gordon 方程可以描述自旋为零或整数相对论运动粒子。强耦合条件下,环状非中心势是一类重要的势函数,Klein-Gordon 方程可描述非中心势这类系统的性质。本文提出了一种新的环 $V(r,\theta)=\frac{\alpha}{r}+\frac{\beta}{r^2\sin^2\theta}+\gamma\frac{\cos^2\theta}{r^2\sin^2\theta}$,在标量势与矢量势相等的条件下,给出了 Klein-Gordon 方程的束缚态解 $H_{l'm'}(x)=P_{l'}^{m'}(x)=N_{l'm'}(1-x^2)^{m'/2}\sum_{k=0}^{[\frac{l-m'}{2}]}\frac{(-1)^k\Gamma(2l'-2k+1)}{2^{l'}k!(l'-m'-2k)!\Gamma(l'-k+1)}x^{l'-m'-2k}$。通过分离变量得到 Klein-Gordon 方程相应的角向方程 $\left[\frac{d^2}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{d}{dr}-\frac{2(E+\mu)\alpha}{r}-\frac{l(l+1)}{r^2}+(E^2-\mu^2)\right]R(r)=0$,径向方程 $\left\{\frac{d^2}{d\theta^2}+\cot\theta\frac{d}{d\theta}\left[l(l+1)-\frac{2(\mu+E)\gamma\cos^2\theta+m^2+2(\mu+E)\beta}{\sin^2\theta}\right]\right\}H(\theta)=0$,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 $E_{n_r,l}=-\mu\frac{(n_r+l+1)^2-\alpha^2}{(n_r+l+1)^2+\alpha^2}$,进而获得了精确的束缚态能谱方程,符合苯分子的电子云分布。

关键词:环状势;Klein-Gordon 方程;束缚态;广义连带勒让德多项式

中图分类号:O562.1;O413.1 **文献标识码**:A **文章编号**:1672-6693(2010)04-0051-04

在强耦合条件下,势场中运动粒子的相对论效应变得十分重要,而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]。在以前的研究中,人们已求得了在 Hulthen 势[2-4],Hartmann 势[5-8],Pöschl-Teller 势[9],Wood-Saxon 势[10-11],Kratzer 势[12],无反射势[13],$\tan^2(\pi\eta r)$ 势[14],Rosen-Morse 势[15],非谐振子势[16-18],Makarov [19]等势函数中标量势等于或大于矢量势的 Klein-Gordon 方程或 Dirac 方程的束缚态解。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以及量子点共振隧穿中能带结构等相对论问题中发展起来的相互作用势模型,其中绝大多数为非中心势。

在量子力学中谐振子势是一个可精确求解的势函数,并有着广泛的应用。球谐振子势作为原子核壳层结构的有心势,很好地描述了核的单粒子运动。然而考虑双原子分子势的典型势函数时,实际原子核会偏离轴对称及球对称谐振子模型,提出了一些非球谐振子模型,由球谐振子势和其他形式的附加势构成非中心势,而环状分子势属于非中心势,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[20-22],谐振子势加上负2次幂函数势构成的混合势[17-18]等。这些势函数的特点为库仑势附加上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。本文提出一种新环状非中心势,它是在库仑势的基础上再叠加2项非中心势,共计3项势函数,其等势线簇可视为环状闭合曲线簇,等势面簇为轴对称性旋转曲面簇,比较符合苯分子的电子云分布,其表达式为

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

其中 α,β 和 γ 是实参数。

* 收稿日期:2009-10-11 修回日期:2010-03-09
资助项目:重庆市教委基础理论研究基金(No. KJ080825)
作者简介:闫秀明,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

本文考虑到相对论效应,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)式条件下的 Klein-Gordon 方程束缚态解,即得到了该量子系统的角向波函数和径向波函数以及能谱方程,并对获得的相关结果作适当讨论与结论。

1 等标量和矢量势 Klein-Gordon 方程的分离变量

等标量和矢量势 Klein-Gordon 方程的分离变量由下式给出势[19] $(h=c=1)$

$$[p^2-(E-V(r))^2]\varphi(r,\theta,\phi)=-(\mu+S(r))^2\varphi(r,\theta,\phi) \tag{2}$$

其中 p 表示动量算符,E 和 μ 分别表示能量和粒子的静止质量。当标量势等于矢量势时,即

$$S(r,\theta)=V(r,\theta)=\frac{\alpha}{r}+\frac{\beta}{r^2\sin^2\theta}+\gamma\frac{\cos^2\theta}{r^2\sin^2\theta} \tag{3}$$

在球极坐标系中,令

$$\varphi(r,\theta,\phi)=R(r)H(\theta)\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\phi},\quad m=0,\pm1,\pm2,\pm3,\cdots \tag{4}$$

把(3)、(4)式代入(2)式,利用分离变量的标准方式,对 $H(\theta)$ 和 $R(r)$ 函数方程分别获得如下形式

$$\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}+\frac{2}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}-\frac{2(E+\mu)\alpha}{r}-\frac{l(l+1)}{r^2}+(E^2-\mu^2)\right]\cdot R(r)=0 \tag{5}$$

$$\left\{\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\theta^2}+\cot\theta\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\left[l(l+1)-\frac{2(\mu+E)\gamma\cos^2\theta+m^2+2(\mu+E)\beta}{\sin^2\theta}\right]\right\}\cdot H(\theta)=0 \tag{6}$$

其中 l 是一个分离常数。

2 Klein-Gordon 方程 θ 角方程的解

令 $m'=\sqrt{2(\mu+E)\gamma+m^2+2(\mu+E)\beta}$

$l(l+1)+2(\mu+E)\gamma=l'(l'+1)$

且令 $x=\cos\theta$,那么(6)式变为

$$(1-x^2)\frac{\mathrm{d}^2H(x)}{\mathrm{d}x^2}-2x\frac{\mathrm{d}H(x)}{\mathrm{d}x}+\left[l'(l'+1)-\frac{(m')^2}{1-x^2}\right]H(x)=0 \tag{7}$$

(7)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。(7)式的 H 满足的边界条件是 $H(0)$ 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 $l'=0,1,2,\cdots$ 众所周知,物理上 l' 和 m' 分别表示粒子处于定态时的轨道角动量量子数和轨道角动量磁量子数,(7)式的解为广义的连带勒让德多项式,结果为

$$H_{l'm'}(x)=P_{l'}^{m'}(x)=N_{l'm'}(1-x^2)^{m'/2}\cdot\sum_{k=0}^{[\frac{1-m'}{2}]}\frac{(-1)^k\Gamma(2l'-2k+1)}{2^{l'}k!(l'-m'-2k)!\Gamma(l'-k+1)}x^{l'-m'-2k}$$

其中 $N_{l'm'}=\sqrt{\frac{(2l'+1)(l'-m')!}{2\Gamma(l'+m'+1)}}$ 为归一化常数。

3 径向解方程

在径向方程(5)式中,令

$$A=2(\mu+E)\alpha \tag{8}$$

$$B^2=-(E^2-\mu^2) \tag{9}$$

$$R(r)=r^{-(l+1)}f(r) \tag{10}$$

把(8)、(9)和(10)式代入(5)式,则(5)式变为

$$\left[r\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}-2l\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}-A-B^2r\right]f(r)=0 \tag{11}$$

采取拉普拉斯变换 $L[f(t)]=\int_0^\infty f(t)\mathrm{e}^{-pt}\mathrm{d}t=F(p)$,(11)式变为

$$\left[(p^2-B^2)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p}+2(l+1)p+A\right]F(p)=0 \tag{12}$$

(12)式的解为

$$F(p)=C'(p+B)^{-2(l+1)}\left[\frac{p-B}{p+B}\right]^{n_r} \tag{13}$$

其中 C' 是积分常数,且

$$n_r=\frac{-2(l+1)B-A}{2B} \tag{14}$$

当 $n_r=0,1,2,3,\cdots$ 时,(13)式采取如下展开

$$F(p)=C'\sum_{j=0}^{n}\frac{(-2B)^j n_r!}{j!(n_r-j)!}(p+B)^{-(j+2l+2)} \tag{15}$$

对(15)式采取拉普拉斯逆变换,为

$$f(r)=C'r^{2l+1}\mathrm{e}^{-Br}\frac{1}{\Gamma(2l+2)}\cdot\sum_{j=0}^{n_r}\frac{(-1)^j n_r!\Gamma(2l+2)}{j!(n_r-j)!\Gamma(j+2l+2)}(2Br)^j \tag{16}$$

把(16)式与合流超几何函数比较,有

$$R(r)=C_r^l\mathrm{e}^{-Br}F(-n_r,2l+2,2Br)$$

考虑一般拉盖尔函数与合流超几何函数的联系,有

$$R(r)=D_{n_r,l}r^l\mathrm{e}^{-Br}L_{n_r}^{2l+2}(2Br)$$

其中 $D_{n_r,l}$ 是径向波函数归一化常数,由归一化条件 $\int_0^\infty R^2(r)r^2\mathrm{d}r=1$,一般拉盖尔多项式正交化和递归关系,有

$$D_{n_r,l}=(2B)^{l+1}\left[\frac{Bn!}{(n_r+l+1)\Gamma(n_r+2l+2)}\right]^{\frac{1}{2}}$$

把(8)、(9)式带入(14)式,得能谱方程

$$E_{n_r,l}=-\mu\left[\frac{(n_r+l+1)^2-\alpha^2}{(n_r+l+1)^2+\alpha^2}\right]$$

4 结论

上述结果表明,本文提出这种新环状非中心势在标量势与矢量势相等条件下,获得 Klein-Gordon 方程的束缚态解,从而相对论性问题得到了解决。Klein-Gordon 方程的角向分量和径向分量分别满足超几何方程和合流超几何方程,其解可以用超几何函数、合流超几何函数或拉盖尔多项式表示,束缚态的能谱方程则由径向波函数的束缚态边界条件得到,即满足量子化条件。各种环状非球谐振子势的主要差别在于其环状势的不同,本文提出一种新环状非中心势,它是在库仑势的基础上再叠加 2 项非中心势,共计 3 项势函数,其等势线簇可视为环状闭合曲线簇,等势面簇为轴对称性旋转曲面簇,比较符合苯分子的电子云分布。从(1)式表达式看出,这个势是典型的非中心势,当 $\gamma=0$,$\alpha=2\alpha_0\varepsilon_0\eta\sigma^2$ 和 $\beta=-q\varepsilon_0a_0^2\sigma^2\eta^2$ 时,这个势退化为 Hartmann 势[20];当 $\gamma=0$,$\beta=0$ 和 $\alpha=-ze^2$,这个势退化为库仑势,通过拉普拉斯变换方法和数学技巧,即可获得归一化径向波函数以及归一化角向波函数,同时,自然就获得了能谱方程。

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] Dominguez-Adame F. Bound states of the klein-Gordon equation with vector and scalar hulthen type potentials[J]. Phys Lett,1989,A136(4):175-179.

[3] 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.

[4] Guo J Y,Meng J,Xu F X. Solution of the dirac equation with special hulthen potentials[J]. Chin Phys Lett,2003,20:602-605.

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

[6] Li Z Y,Guo J Y. Exact solution of Klein-Gordon equation for generalized asymmetrical hartmann potentials[J]. J At Mol Phys,2008,25:231-235.

[7] Wei G F,Long C Y,He Z,et al. The relativistic bound state solution of the hartmannpotential plus a new ring-shaped potential[J]. J At Mol Phys,2007,24:973-978.

[8] Chen C Y,Liu C L,Sun D S. The normalizied wavefunctions of the hartmann potential and explicit expression for their radial average values[J]. Phys Lett,2002,A305:341-344.

[9] 张民仓,王振邦 . 第二类 Pöschl-Teller 势场中相对论粒子的束缚态[J]. 物理学报,2006,55:525-530.

[10] 陈刚. 具有 Wood-Saxon 势的 Dirac 方程的束缚态[J]. 物理学报,2004,53:680-682.

[11] Hou C F,Zhou Z X,Li Y. Bound states of Klein-Gordon equation with vector and scalar Wood-Saxon potential[J]. Chin Phys,1999,8:561-563.

[12] 郭建友,徐辅新. 具有 Kratzer-type 型标量势的 Klein-Gordon 方程和 Dirac 方程的束缚态[J]. 原子与分子物理学报,2002,19:313-315.

[13] 陈刚,楼智美. 无反射势阱中相对论粒子的束缚态[J]. 物理学报,2003,52:1071-1073.

[14] 郭建友. 型势阱中相对论粒子的束缚态[J]. 物理学报,2002,51:1453-1455.

[15] 陈刚. Rosen-Morse 势阱中相对论粒子的束缚态[J]. 物理学报,2004,53:684-686.

[16] Chen G,Chen Z D,Lou Z M. Bound states of the klein-Grdon and dirac equation for scalar and vector pseudoharmonic oscillator potentials[J]. Chin Phys,2004,13:279-281.

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

[18] 龙晓霞. 非谐振子的能量与固体热弹性效应[J]. 西南师范大学学报(自然科学版),1999,24(3):297-302.

[19] Greiner W. Relativistic quantum,mechanics[M]. New York:Springer, 2000.

[20] Chen C Y,Dong S H. Exactly complete solutions of the coulomb potential plus a new ring-shaped potential[J]. Phys Lett A,2005,335:374-376.

[21] 胡先权,王帮美,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.

[22] 王帮美,胡先权. 非球谐环形振子势的 Schrodinger 方程的解析解[J]. 重庆师范大学学报,2008,25:63-66.

Bound States Solution of Klein-Gordon Equation for a New Ring-shaped Potential

YAN Xiu-ming, HU Xian-quan

(College of Physics and Electronic Engineering, Chongqing Normal University, Chongqing400047, China)

Abstract: When a particle moves in a strong potential field, the movement of particles relativistic effects become very important, but when taking into account the relativistic effect. Klein-Gordon equation can describe the potential field is zero or integer spin in the relativistic movement of particles. So under the condition of strong coupling, ring of non-central potential has become one of very important potential function. Klein-Gordon equation can study the cyclic nature of the non-central potential of such systems. In this paper, a new ring-shaped oscillator potential is proposed $V(r,\theta)=\frac{\alpha}{r}+\frac{\beta}{r^2\sin^2\theta}+\gamma\frac{\cos^2\theta}{r^2\sin^2\theta}$. The exact bound solution of Klein-Gordon equation for the above potential is obtained under the condition of equal scalar and vector potentials $H_{l'm'}(x)=P_{l'}^{m'}(x)=N_{l'm'}(1-x^2)^{m'/2}\sum_{k=0}^{[\frac{l-m'}{2}]}\frac{(-1)^k\Gamma(2l'-2k+1)}{2^{l'}k!(l'-m'-2k)!\Gamma(l'-k+1)}x^{l'-m'-2k}$. Klein-Gordon equation can be separated into an angular equation and a radial equation with the help of separation variable $[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}+\frac{2}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}-\frac{2(E+\mu)\alpha}{r}-\frac{l(l+1)}{r^2}+(E^2-\mu^2)]R(r)=0$, $\left\{\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\theta^2}+\cot\theta\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\left[l(l+1)-\frac{2(\mu+E)\gamma\cos^2\theta+m^2+2(\mu+E)\beta}{\sin^2\theta}\right]\right\}H(\theta)=0$. The normalized angle and radial wave unction were expressed respectively in terms of the universal associated-Legendre function and the confluent hypergeometric function are presented. The exact energy spectrum equations $E_{n_r,l}=-\mu\frac{(n_r+l+1)^2-\alpha^2}{(n_r+l+1)^2+\alpha^2}$ are obtained and meanwhile, proper discussion and some important conclusions are presented.

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

（责任编辑　欧红叶）