第 52 卷 第 5 期 2003 年 5 月
1000-3290/2003/52(05)/1075-04

物 理 学 报
ACTA PHYSICA SINICA

Vol.52, No.5, May, 2003

四参数双原子分子势阱中相对论粒子的束缚态

陈 刚 楼智美

(绍兴文理学院物理系, 绍兴 312000)

(2002 年 8 月 7 日收到; 2002 年 10 月 14 日收到修改稿)

给出了具有四参数双原子分子势型标量势与矢量势的 Klein-Gordon 方程和 Dirac 方程的 s 波束缚态解.

关键词: 四参数双原子分子势, Klein-Gordon 方程, Dirac 方程, 束缚态
PACC: 0365

1. 引 言

在强耦合条件下,在势场中运动的粒子的相对论效应变得非常重要[1],而在考虑相对论效应时,处于势场中运动的粒子需要用 Klein-Gordon 方程或 Dirac 方程来描述. Dominguez-Adame[2] 和 Talukdar 等人[3] 分别给出了具有 Hulthén 势的 Klein-Gordon 方程的 s 波束缚态解和散射态解;胡嗣柱等人[4] 给出了在 Hulthén 标量势与矢量势相等的条件下 Dirac 方程的 s 波束缚态解;侯春风等人分别给出了在 Morse 和 Woods-Saxon 标量势与矢量势相等的条件下 Klein-Gordon 方程和 Dirac 方程的 s 波束缚态解[5,6];郭建友给出了在 $\tan^2(\pi\eta r)$ 标量势与矢量势相等的条件下 Klein-Gordon 方程和 Dirac 方程的 s 波束缚态解[7]. 强隐朝给出了在谐振子标量势与矢量势相等的条件下 Klein-Gordon 方程和 Dirac 方程的束缚态解[8]. 作者已经给出了在 Pöschl-Teller 标量势与矢量势相等的条件下 Klein-Gordon 方程和 Dirac 方程的 s 波束缚态解[9],本文将考虑粒子在四参数双原子分子势中的相对论效应,在四参数双原子分子势型标量势与矢量势相等的条件下,分别给出了 Klein-Gordon 方程和 Dirac 方程的 s 波束缚态解.

四参数双原子分子势函数为

$$V(x) = D_e\left[\frac{A}{(e^{\alpha x}-\lambda)^2} - \frac{B}{(e^{\alpha x}-\lambda)}\right],$$

$$A = (e^{\alpha}-\lambda)^2,\ B = 2(e^{\alpha}-\lambda),$$

其中 $x = r/r_e$, r 是径向坐标, r_e 是平衡距离, D_e 是势阱深度, α 是描写势函数衰减快慢的参数,第四参数 λ 可通过拟合实验 RKR 曲线得到,计算精度比 Morse 势有很大提高[10]. 在通常量子理论范围,处在此势阱中的微观粒子既存在有限个束缚态,又存在连续态,两种类型的本征函数都可以严格求解,是一维精确可解问题的典型实例。

2. 具有四参数双原子分子势型标量势与矢量势的 Klein-Gordon 方程的 s 波束缚态解

文献[2]指出,具有标量势 $S(r)$ 与矢量势 $V(r)$ 的 s 波的 Klein-Gordon 方程为($\hbar = \mu = 1$)

$$\left\{\frac{d^2}{dr^2} + [E - V(r)]^2 - [M + S(r)]^2\right\}u(r) = 0$$

$$\left[R(r) = \frac{u(r)}{r}\right]. \tag{1}$$

对于四参数双原子分子势,在标量势与矢量势相等的条件下, s 波的 Klein-Gordon 方程为

$$\left\{\frac{d^2}{dx^2} - 2(E+M)D_e\left[\frac{A}{(e^{\alpha x}-\lambda)^2} - \frac{B}{(e^{\alpha x}-\lambda)}\right] + (E^2 - M^2)\right\}u(x) = 0. \tag{2}$$

对于 $\lambda > 0$,可令

$$y = \lambda e^{-\alpha x}, \tag{3}$$

$$\beta^2 = -\frac{r_e^2(E^2 - M^2)}{\alpha^2}, \tag{4}$$

$$\gamma^2 = \frac{2D_e r_e^2(E+M)B}{\alpha^2\lambda}, \tag{5}$$

$$\delta^2 = \frac{2D_e r_e^2(E+M)A}{\alpha^2\lambda^2}. \tag{6}$$

方程(2)化为

$$\left\{y^2\frac{d^2}{dy^2} + y\frac{d}{dy} + \left[-\beta^2 + \frac{\gamma^2 y}{(1-y)} - \frac{\delta^2 y^2}{(1-y)^2}\right]\right\}u(y) = 0, \tag{7}$$

求解方程(7)的边界条件为

当 $y=0$,即 $r\to\infty$ 时,$u=0$,

当 $y=\lambda\approx1$,即 $r\to0$ 时,$u=0$.

利用超几何级数可解出方程(7),得到[11](未归一化)

$$u(y)\approx y^{\beta}(1-y)^{m}F(a,b,c,y),\tag{8}$$

其中

$$a=\beta+m+\sqrt{\beta^2+\gamma^2+m(m-1)},\tag{9}$$

$$b=\beta+m-\sqrt{\beta^2+\gamma^2+m(m-1)},\tag{10}$$

$$m=\frac{1}{2}+\sqrt{\delta^2+\frac{1}{4}},\tag{11}$$

$$c=2\beta+1.\tag{12}$$

本征值条件为[10]

$$b=-n,\qquad n=1,2,3,\cdots\tag{13}$$

由(4)式、(10)式、(13)式可得

$$\sqrt{r_e^{\,2}(M^2-E^2)}-\sqrt{r_e^{\,2}(M^2-E^2)+\alpha^2\gamma^2+\alpha^2m(m-1)}+\alpha m=-\alpha n,\tag{14}$$

(14)式为四参数双原子分子势型 s 波束缚态满足的能谱方程($\lambda>0$),由它决定能级 E_n.相应的波函数为(未归一化)

$$u_n(x)=\lambda^{\beta}\mathrm{e}^{-\alpha\beta x}(1-\lambda\mathrm{e}^{-\alpha x})^{m}F(a,b,c,\lambda\mathrm{e}^{-\alpha x}).\tag{15}$$

对于 $\lambda<0$,可令

$$y=|\lambda|\mathrm{e}^{-\alpha x}/(1+|\lambda|\mathrm{e}^{-\alpha x})\qquad(100\leqslant\lambda<0),\tag{16}$$

方程(2)可化为

$$\left\{y(1-y)\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}y^2}+(1-2y)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}y}+\left[\delta^2-\frac{\beta^2}{y}+\frac{(\gamma^2-\beta^2-\delta^2)}{1-y}\right]\right\}u(y)=0,\tag{17}$$

求解方程(17)的边界条件为

当 $y=0$,即 $r\to\infty$ 时,$u=0$,

当 $y=|\lambda|/(1+|\lambda|)\approx1$,即 $r\to0$ 时,$u=0$.

利用超几何级数可解出方程(17),得到[11](未归一化)

$$u(y)\approx y^{\beta}(1-y)^{v}F(a,b,c,y),\tag{18}$$

其中

$$a=\beta+v-m+1,\tag{19}$$

$$b=\beta+v+m,\tag{20}$$

$$v=\sqrt{\beta^2+\delta^2-\gamma^2},\tag{21}$$

$$m=\frac{1}{2}-\sqrt{\delta^2+\frac{1}{4}},\tag{22}$$

$$c=2\beta+1.\tag{23}$$

由(4)式、(13)式、(20)式、(21)式可得

$$\sqrt{r_e^{\,2}(M^2-E^2)}-\sqrt{r_e^{\,2}(M^2-E^2)+\alpha^2\delta^2-\alpha^2\gamma^2}+\alpha m=-\alpha n,\tag{24}$$

(24)式为四参数双原子分子势型 s 波束缚态满足的能谱方程($\lambda<0$),由它决定能级 E_n.相应的波函数为(未归一化)

$$u_n(x)=(|\lambda|\mathrm{e}^{-\alpha x})^{\beta}(1+|\lambda|\mathrm{e}^{-\alpha x})^{-(\beta+v)}\times F(a,b,c,|\lambda|\mathrm{e}^{-\alpha x}/(1+|\lambda|\mathrm{e}^{-\alpha x})).\tag{25}$$

3. 具有四参数双原子分子势型标量势与矢量势的 Dirac 方程的束缚态解

文献[4]指出,具有标量势 $S(r)$ 与矢量势 $V(r)$ 的 Dirac 方程为($\hbar=\mu=1$)

$$\{\boldsymbol{C}\cdot\boldsymbol{P}+D[M+S(r)]\}\psi=[E-V(r)]\psi,\tag{26}$$

在相对论情况下,中心力场中粒子的守恒量完全集可以取为($H,\boldsymbol{K},\boldsymbol{J}^2,\boldsymbol{J}_z$),($H,\boldsymbol{K},\boldsymbol{J}^2,\boldsymbol{J}_z$)的共同本征函数为[12]

$$\psi=\frac{1}{r}\begin{pmatrix}f_{n,K}(r)\phi^{A}_{jm_j}\\ \mathrm{i}g_{n,K}(r)\phi^{B}_{jm_j}\end{pmatrix}\qquad\left(\text{当 }K=j+\frac{1}{2}\text{ 时}\right),\tag{27}$$

$$\psi=\frac{1}{r}\begin{pmatrix}f_{n,K}(r)\phi^{B}_{jm_j}\\ \mathrm{i}g_{n,K}(r)\phi^{A}_{jm_j}\end{pmatrix}\qquad\left(\text{当 }K=-\left(j+\frac{1}{2}\right)\text{ 时}\right),\tag{28}$$

其中

$$\phi^{A}_{jm_j}=\begin{pmatrix}\sqrt{\dfrac{j+m_j}{2j}}Y_{j-\frac{1}{2},m_j-\frac{1}{2}}\\ \sqrt{\dfrac{j-m_j}{2j}}Y_{j-\frac{1}{2},m_j+\frac{1}{2}}\end{pmatrix},\qquad \phi^{B}_{jm_j}=\begin{pmatrix}-\sqrt{\dfrac{j-m_j+1}{2j+2}}Y_{j+\frac{1}{2},m_j-\frac{1}{2}}\\ \sqrt{\dfrac{j+m_j+1}{2j+2}}Y_{j+\frac{1}{2},m_j+\frac{1}{2}}\end{pmatrix}.\tag{29}$$

把(27)式或(28)式代入(26)式,可分离出 Dirac 方程的径向部分为

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}r}-\frac{K}{r}f=[M+E+S(r)-V(r)]g,\tag{30}$$

$$\frac{\mathrm{d}g}{\mathrm{d}r}+\frac{K}{r}g=[M-E+S(r)+V(r)]f.\tag{31}$$

对于四参数双原子分子势,在标量势与矢量势相等

的条件下,方程(30),(31)变为

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}-\frac{K}{x}f=(M+E)g,\tag{32}$$

$$\frac{\mathrm{d}g}{\mathrm{d}x}+\frac{K}{x}g=\left\{(M-E)+2D_{\mathrm{e}}\left[\frac{A}{(\mathrm{e}^{\alpha x}-\lambda)^2}-\frac{B}{(\mathrm{e}^{\alpha x}-\lambda)}\right]\right\}f.\tag{33}$$

把(32)式代入(33)式可得

$$\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}-2(E+M)D_{\mathrm{e}}\left[\frac{A}{(\mathrm{e}^{\alpha x}-\lambda)^2}-\frac{B}{(\mathrm{e}^{\alpha x}-\lambda)}\right]+(E^2-M^2)-\frac{K(K-1)}{x}\right]f=0.\tag{34}$$

对于 s 波,即 $K=1$.方程(27)变为

$$\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}-2(E+M)D_{\mathrm{e}}\left[\frac{A}{(\mathrm{e}^{\alpha x}-\lambda)^2}-\frac{B}{(\mathrm{e}^{\alpha x}-\lambda)}\right]+(E^2-M^2)\right]f=0.\tag{35}$$

方程(35)与方程(2)完全类似,于是立即可得:

对于 $\lambda>0$,能量 $E_{n,1}$ 满足的方程是

$$\sqrt{r_{\mathrm{e}}^{2}(M^2-E_{n,1}^2)}-\sqrt{r_{\mathrm{e}}^{2}(M^2-E_{n,1}^2)+\alpha^2\gamma^2+\alpha^2m(m-1)}+\alpha m=-\alpha n,\tag{36}$$

与 $E_{n,1}$ 相对应的 $f_{n,1}(x)$ 分量为(未归一化)

$$f_{n,1}(x)=\lambda^{\beta}\mathrm{e}^{-\alpha\beta x}(1-\lambda\mathrm{e}^{-\alpha x})^{m}F(a,b,c,\lambda\mathrm{e}^{-\alpha x}).\tag{37}$$

由(32)式可得 $g_{n,1}(x)$ 分量为(未归一化)

$$\begin{aligned}g_{n,1}(x)=\frac{1}{M+E_{n,1}}\Big\{&-\alpha\beta\lambda^{\beta}\mathrm{e}^{-\alpha\beta x}(1-\lambda\mathrm{e}^{-\alpha x})^{m}\\&\times F(a,b,c,\lambda\mathrm{e}^{-\alpha x})\\&+m\alpha\lambda^{\beta+1}\mathrm{e}^{-\alpha\beta x}(1-\lambda\mathrm{e}^{-\alpha x})^{m-1}\\&\times F(a,b,c,\lambda\mathrm{e}^{-\alpha x})\\&-\alpha\lambda^{\beta+1}\frac{a\cdot b}{c}\mathrm{e}^{-\alpha\beta x}(1-\lambda\mathrm{e}^{-\alpha x})^{m}\\&\times F(a+1,b+1,c+1,\lambda\mathrm{e}^{-\alpha x})\\&-\frac{\lambda^{\beta}}{x}\mathrm{e}^{-\alpha\beta x}(1-\lambda\mathrm{e}^{-\alpha x})^{m}\\&\times F(a,b,c,\lambda\mathrm{e}^{-\alpha x})\Big\}.\end{aligned}\tag{38}$$

把 $f_{n,1}(x)$ 和 $g_{n,1}(x)$ 代入(27)式,可给出在 $\lambda>0$ 下 Dirac 方程的 s 波旋量波函数.

对于 $\lambda<0$,能量 $E_{n,1}$ 满足的方程是

$$\sqrt{r_{\mathrm{e}}^{2}(M^2-E_{n,1}^2)}-\sqrt{r_{\mathrm{e}}^{2}(M^2-E_{n,1}^2)+\alpha^2\delta^2-\alpha^2\gamma^2}+\alpha m=-\alpha n,\tag{39}$$

与 $E_{n,1}$ 相对应的 $f_{n,1}(x)$ 分量为(未归一化)

$$f_{n,1}(x)=(|\lambda|\mathrm{e}^{-\alpha x})^{\beta}(1+|\lambda|\mathrm{e}^{-\alpha x})^{-(\beta+v)}\times F(a,b,c,|\lambda|\mathrm{e}^{-\alpha x}/(1+|\lambda|\mathrm{e}^{-\alpha x})).\tag{40}$$

由(30)式可得 $g_{n,1}(x)$ 分量为(未归一化)

$$\begin{aligned}g_{n,1}(x)=\frac{1}{M+E_{n,1}}\Big\{&-\alpha\beta(|\lambda|)^{\beta}\mathrm{e}^{-\alpha\beta x}\\&\times(1+|\lambda|\mathrm{e}^{-\alpha x})^{-(\beta+v)}\\&\times F(a,b,c,|\lambda|\mathrm{e}^{-\alpha x}/(1+|\lambda|\mathrm{e}^{-\alpha x}))\\&+\alpha(\beta+v)(|\lambda|)^{\beta+1}\mathrm{e}^{-\alpha\beta x}(1+|\lambda|\\&\times\mathrm{e}^{-\alpha x})^{-(\beta+v+1)}F(a,b,c,|\lambda|\mathrm{e}^{-\alpha x}/\\&(1+|\lambda|\mathrm{e}^{-\alpha x}))-\alpha(|\lambda|)^{\beta+1}\\&\times\frac{a\cdot b}{c}\mathrm{e}^{-\beta(\alpha+1)x}(1+|\lambda|\mathrm{e}^{-\alpha x})^{-(\beta+v+2)}\\&\times F(a+1,b+1,c+1,|\lambda|\mathrm{e}^{-\alpha x}/\\&(1+|\lambda|\mathrm{e}^{-\alpha x}))-\frac{(|\lambda|)^{\beta}}{x}\mathrm{e}^{-\alpha\beta x}\\&\times(1+|\lambda|\mathrm{e}^{-\alpha x})^{-(\beta+v)}F(a,b,c,\\&|\lambda|\mathrm{e}^{-\alpha x}/(1+|\lambda|\mathrm{e}^{-\alpha x}))\Big\}.\end{aligned}\tag{41}$$

把 $f_{n,1}(x)$ 和 $g_{n,1}(x)$ 代入(27)式,可给出在 $\lambda<0$ 下 Dirac 方程的 s 波旋量波函数.

4.结　　论

综上所述,具有相等的标量与矢量四参数双原子分子势型势函数的 Klein-Gordon 方程的 s 波束缚态解可以严格地求出,即在与通常非相对论量子力学的双原子分子问题中处理四参数双原子分子势相同的近似下可以得到方程的解.这时的 s 波 Dirac 方程的 f 分量所满足的方程与 Klein-Gordon 方程非常相似,其解可用同样的方法求得,从而可求出 s 波 Dirac 方程的 g 分量,由此可得出 Dirac 方程的 s 波束缚态旋量波函数.

[1] Wang I C and Wong C Y 1988 *Phys. Rev.* D **38** 348

[2] Dominguez-Adame F 1989 *Phys. Lett.* A **136** 175

[3] Talukdar B, Yunus A and Amin M R 1989 *Phys. Lett.* A **141** 326

[4] Hu S Z and Su R K 1991 *Acta Phys. Sin.* **40** 1201 (in Chinese)[胡嗣柱、苏汝铿 1991 物理学报 **40** 1201]

[5] Hou C F, Li Y, Zhou Z X 1999 *Acta Phys. Sin.* **48** 1999 (in Chinese)[侯春风、李　焱、周忠祥 1999 物理学报 **48** 1999]

[6] Hou C F and Zhou Z X 1999 *Acta Phys. Sin.* (Overseas Edition) **8**

561

[7] Guo J Y 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 1453 (in Chinese) [郭建友 2002 物理学报 **51** 1453]

[8] Qiang W C 2002 *Chin. Phys.* **11** 757

[9] Chen G 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 1651 (in Chinese) [陈 刚 2001 物理学报 **50** 1651]

[10] Sun J X 1999 *Acta Phys. Sin.* **48** 1992 (in Chinese) [孙久勋 1999 物理学报 **48** 1992]

[11] Wang Z X and Guo D R 2000 *Introduction To Special Function* (Beijing: Peking University Press) (in Chinese) [王竹溪、郭敦仁 2000 特殊函数概论(北京 北京大学出版社)]

[12] Zeng J Y 1997 *Quantum Mechanics* Vol Ⅱ, 2 nd (Beijing: Science Press) (in Chinese) [曾谨言 1997 量子力学 卷Ⅱ 第二版(北京:科学出版社)]

Bound states of relativistic particles in a potential with four parameters for diatomic molecules

Chen Gang Lou Zhi-Mei

(*Department of Physics*, *Shaoxing College of Arts and Sciences*, *Shaoxing* 312000, *China*)

(Received 7 August 2002; revised manuscript received 14 October 2002)

Abstract

The s-wave bound states of Klein-Gordon equation and Dirac equation with scalar and vector potentials with four parameters for diatomic molecules are obtained.

Keywords: potential with four parameters for diatomic molecules, Klein-Gordon equation, Dirac equation, bound state

PACC: 0365