第 54 卷 第 6 期 2005 年 6 月
1000-3290/2005/54(06)/2524-04

物 理 学 报
ACTA PHYSICA SINICA

Vol.54,No.6,June,2005

Hartmann 势的 Klein-Gordon 方程束缚态解及递推关系

陈子栋 陈 刚
(绍兴文理学院物理系,绍兴 312000)
(2004 年 11 月 5 日收到)

给出了在 Hartmann 型标量势与矢量势相等的条件下其 Klein-Gordon 方程束缚态解.结果表明,径向波函数可用广义 Laguerre 多项式表示,其角向波函数可用 Legendre 多项式表示.另外,给出了径向波函数关于角量子数 l 和量子数 n 的二类新递推关系.

关键词:Hartmann 势,Klein-Gorgon 方程,束缚态,递推关系
PACC:0365

1. 引 言

众所周知,在强势场中运动的粒子,必须考虑相对论效应,用相对论量子力学处理.零自旋的粒子满足 Klein-Gordon 方程,而 1/2 自旋的粒子则用 Drace 方程描述[1,2].在此之前的研究中,人们已经给出了一些典型势函数的 Klein-Gordon 方程或 Drace 方程的束缚态解[3—16].

Hartmann 势是在量子化学中研究环状分子(如苯分子)模型时引入的一个很重要的环形势函数,其表示式为[17]

$$V(r,\theta) = -\frac{a}{r} + \frac{b}{(r\sin\theta)^2}, \tag{1}$$

式中 $a = \eta\sigma^2 e^2$, $b = \dfrac{\hbar^2\eta^2\sigma^2}{2\mu}$,其中 μ 为粒子的质量,η 和 σ 是正实参量,取值范围为 1 到 10.关于对该势函数的讨论一直受到广泛的兴趣[18—30].但是,至今还没有对 Hartmann 势 Klein-Gordon 方程的讨论.因此,本文将给出在 Hartmann 型标量势与矢量势相等的条件下,Klein-Gordon 方程的束缚态解,尤其是对 Hartmann 势的径向方程采用 Laplace 变换方法求其精确解,同时首次推导了径向波函数的二类递推关系.

2. Hartmann 势 Klein-Gordon 方程的 θ 角向方程解

当标量势等于矢量势时的 Klein-Gordon 方程为($\hbar = c = 1$)

$$\begin{aligned}&[\hat{p}^2 - (E - V(r))^2]\varphi(r,\theta,\phi)\\&= -(\mu + V(r))^2\varphi(r,\theta,\varphi),\end{aligned} \tag{2}$$

式中 $\hat{p}$ 为动量算符,E 和 μ 分别是粒子的能量与粒子静止质量,则 $\varphi(r,\theta,\phi)$ 可表为

$$\varphi(r,\theta,\phi) = R(r)H(\theta)\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\phi},$$

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \cdots \tag{3}$$

上式代入方程(2)则可得

$$\begin{aligned}&\Big[\frac{d^2}{d\theta^2} + \mathrm{ctg}(\theta)\frac{d}{d\theta} - (2(E+\mu)b\\&+ m^2)\csc^2\theta + l(l+1)\Big]H(\theta) = 0,\end{aligned} \tag{4}$$

$$\begin{aligned}&\Big[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr} - \frac{2(E+\mu)a}{r}\\&- \frac{l(l+1)}{r^2} + (E^2 - \mu^2)\Big]R(r) = 0.\end{aligned} \tag{5}$$

在方程(4)中设

$$x = \cos\theta, \tag{6}$$

$$\nu = (m^2 + 2(E+\mu)b)^{1/2}, \tag{7}$$

代入方程(4)中,则方程(4)变为

$$\Big[(1-x^2)\frac{d^2}{dx^2} - 2x\frac{d}{dx} + l(l+1) - \frac{\nu^2}{1-x^2}\Big]H(x) = 0. \tag{8}$$

方程(8)为一连带 Legendre 方程,当 $-1 \leqslant x \leqslant 1$, $l = 0,1,2,\cdots,\nu$ 为整数时,其解为 Legendre 多项式 $P_l^\nu(x)$, $l \geqslant \nu \geqslant 0$,由角向归一化条件 $\int_0^\pi (H(\theta))^2 \sin^2\theta d\theta = 1$ 可得

$$H(\theta) = C_{1,\nu}P_l^{\nu}(\cos\theta), \tag{9}$$

其中归一化系数 $C_{l,\nu}$ 为

$$C_{1,\nu} = \left[\frac{(2l+1)(l-\nu)!}{2(l+\nu)!}\right]^{1/2}. \tag{10}$$

3. Hartmann 势 Klein-Gordon 方程的 r 径向方程的精确解

在 Hartmann 势的 Klein-Gordon 方程的 r 径向方程中设

$$A = 2(E+\mu)a, \tag{11}$$

$$\beta^2 = -(E^2-\mu^2), \tag{12}$$

$$R(r) = r^{-(l+1)}f(r), \tag{13}$$

代入方程(5),则方程(5)变为

$$\left[r\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} - 2l\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} - A - \beta^2 r\right]f(r) = 0. \tag{14}$$

对方程(14)应用 Laplace 变换 $L[f(t)] = \int_0^\infty f(t)\mathrm{e}^{-pt}\mathrm{d}t = F(p)$,则方程(14)变为

$$\left[(p^2-\beta^2)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p} + 2(l+1)p + A\right]F(p) = 0. \tag{15}$$

上式为一阶常微分方程,直接积分得

$$F(p) = C'(p+\beta)^{-2(l+1)}\left(\frac{p-\beta}{p+\beta}\right)^{n_r}, \tag{16}$$

上式中 C' 为积分常数,其中

$$n_r = \frac{-2(l+1)\beta - A}{2\beta}. \tag{17}$$

当 $n_r = 0,1,2,\cdots$ 正整数时,(16)式可展开为级数

$$F(p) = C'\sum_{j=0}^{n}\frac{(-2\beta)^j n_r!}{j!(n_r-j)!}(p+\beta)^{-(j+2l+2)}. \tag{18}$$

对方程(18)进行 Laplace 逆变换,则方程(18)变换为

$$f(r) = C'r^{2l+1}\mathrm{e}^{-\beta r}\frac{1}{\Gamma(2l+2)} \times \sum_{j=0}^{n_r}\frac{(-1)^j n_r!\Gamma(2l+2)}{j!(n_r-j)!\Gamma(j+2l+2)}(2\beta r)^j \tag{19}$$

上式与合流超几何函数比较[31],可得

$$R(r) = Cr^l\mathrm{e}^{-\beta r}F(-n_r, 2l+2, 2\beta r). \tag{20}$$

由广义 Laguerre 函数与合流超几何函数的关系[31],可得

$$R(r) = D_{n_r,l}r^l\mathrm{e}^{-\beta r}L_{n_r}^{2l+2}(2\beta r), \tag{21}$$

上式中 $D_{n_r,l}$ 是径向波函数的归一化系数,由归一化条件 $\int_0^\infty R(r)^2r^2\mathrm{d}r = 1$,及广义 Laguerre 多项式的正交性及递推关系[31]可得

$$D_{n_r,l} = (2\beta)^{l+1}\left[\frac{\beta n_r!}{(n_r+l+1)\Gamma(n_r+2l+2)}\right]^{1/2}. \tag{22}$$

把(11)式和(12)式代入(17)式,可得出能量方程为

$$E_{n_r,l} = -\mu\left(\frac{(n_r+l+1)^2 - a^2}{(n_r+l+1)^2 + a^2}\right). \tag{23}$$

4. 径向波函数的两类递推关系

为了能方便讨论径向波函数的递推关系,把方程(16)改写为

$$G_{n,l}(p,\beta) = (p^2-\beta^2)^{-(l+1)}\left(\frac{p-\beta}{p+\beta}\right)^n, \tag{24}$$

其中 $n = n_r + l + 1$ 为主量子数,把方程(24)代入方程(15),变为

$$(p^2-\beta^2)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p}G_{n,l}(p,\beta) + [2(l+1)p + A]G_{n,l}(p,\beta) = 0. \tag{25}$$

由方程(25)可得关于 $G_{n,l}(p,\beta)$ 角量子数 l 的递减函数为

$$(p^2-\beta^2)G_{n,l}(p,\beta) = G_{n,l-1}(p,\beta). \tag{26}$$

由方程(25)和(26)可得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p}G_{n,l-1}(p,\beta) = -[2lp + A]G_{n,l}(p,\beta). \tag{27}$$

用方程(26),(27)及(17)式可得

$$\left[(lp+\beta n)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p} + 2l^2\right]G_{n,l-1}(p,\beta) = -2\beta^2(l^2-n^2)G_{n,l}(p,\beta). \tag{28}$$

方程(26),(28)为径向函数关于角量子数 l 的递推关系,由方程(24)可得出径向函数关于主量子 n 的递推关系为

$$(p+\beta)G_{n,l}(P,\beta) = (p-\beta)G_{n-1,l}(p,\beta). \tag{29}$$

$$(p-\beta)G_{n,l}(p,\beta) = (p+\beta)G_{n+1,l}(p,\beta). \tag{30}$$

由方程(25),(29)和(30)可得径向函数关于主量子数 n 的递推关系为

$$\left[n+l+1+(p+\beta)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p}\right]G_{n,l}(p,\beta) = (n-l-1)G_{n-1,l}(p,\beta). \tag{31}$$

$$\left[n-l-1-(p-\beta)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p}\right]G_{n,l}(p,\beta) = (n+l+1)G_{n+1,l}(p,\beta). \tag{32}$$

对方程(27)、(28)、(31)和(32)进行 Laplace 逆变换,可得出归一化的径向波函数关于量子数 n 和角量

子数 l 的递推关系为

$$\left[l\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}+\frac{l+1}{r}\right)-\beta n\right]R_{n,l}(r)=\frac{1}{2}\frac{D_{n,l}}{D_{n,l-1}}R_{n,l-1}(r), \tag{33}$$

$$\left[l\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}-\frac{l-1}{r}\right)+\beta n\right]R_{n,l-1}(r)=2\beta^2\left(\frac{l^2}{n^2}-1\right)\frac{D_{n,l-1}}{D_{n,l}}R_{n,l}(r), \tag{34}$$

$$\left[(n-1)-r\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}+\beta\right)\right]R_{n,l}(r)=(n-l-1)\frac{D_{n,l}}{D_{n-1,l}}R_{n-1,l}(r), \tag{35}$$

$$\left[n+1+r\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}-\beta\right)\right]R_{n,l}(r)=(n+l+1)\frac{D_{n,l}}{D_{n+1,l}}R_{n+1,l}(r). \tag{36}$$

以上递推关系式中 $D_{n,l}$ 为归一化系数，$\beta=\frac{2\mu an}{n^2+a^2}$.

5. 结　论

通过以上对 Hartmann 势 Klein-Gordon 方程的求解过程中可以看到，Hartmann 势 Klein-Gordon 方程可精确求解. 在求解径向波函数中应用 Laplace 变换方法使求解严格而简洁，同时很自然得出能量方程，在讨论径向波函数的类递推关系中采用 Laplace 变换法，使递推关系的推导变得非常简单，结果很漂亮，我们首次导出归一化 Hartmann 势径向波函数的两类递推关系式.

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

[2] Zeng J Y 2000 *Quantum Mechanics* Vol Ⅱ 3rd (Beijing：Science Press) (in Chinese) [曾谨言 2000 量子力学(卷Ⅱ)第三版(北京 科学出版社)]

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

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

[5] Hu S Z and Chen C Y 1996 *Journal of Fudan University* (Natural Science) **35** 578 (in Chinese) [胡嗣柱、陈远昌 1996 复旦大学学报(自然科学版) **35** 578]

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

[7] Chen G 2004 *Acta Phys*. *Sin*. **53** 684 (in Chinese) [陈　刚 2004 物理学报 **53** 684]

[8] Guo J Y and Xu F X 2002 *Chinese Journal of Atomic and Molecular Physics* **19** 313 (in Chinese) [郭建友、徐辅新 2002 原子与分子物理学报 **19** 313]

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

[10] Qing W C 2004 *Chin*. *Phys*. **13** 571

[11] Chen G and Lou Z M 2003 *Acta Phys*. *Sin*. **52** 1071 (in Chinese) [陈　刚、楼智美 2003 物理学报 **52** 1071]

[12] Chen G and Lou Z M 2003 *Acta Phys*. *Sin*. **52** 1075 (in Chinese) [陈　刚、楼智美 2003 物理学报 **52** 1075]

[13] Chen Y C，Liu C L，Lu F L and Sun D S 2003 *Acta Phys*. *Sin*. **52** 1580 (in Chinese) [陈远昌、刘成林、陆法林、孙东升 2003 物理学报 **52** 1580]

[14] Qing W C 2002 *Chin*. *Phys*. **11** 157

[15] Qing W C 2003 *Chin*. *Phys*. **12** 136

[16] Qing W C 2004 *Chin*. *Phys*. **13** 575

[17] Hartmann H 1972 *Theor*. *Chim*. *Acta* **24** 201

[18] Hartmann H，Schuck R and Radtke J 1980 *Theor*. *Chim*. *Acta* **46** 1

[19] Hartmann H and Schuck R 1980 *Int*. *J*. *Quan*. *Chem*. **18** 125

[20] Gerry C C 1986 *Phys*. *Lett*. A **118** 445

[21] Kibler M and Negadi T 1984 *Int*. *J*. *Quan*. *Chem*. **26** 405

[22] Kibler M and Negadi T 1984 *Theor*. *Chim*. *Acta* **66** 31

[23] Sokmen M 1986 *Phys*. *Lett*. A **115** 249

[24] Blado G G 1996 *Theor*. *Chim*. *Acta* **94** 53

[25] Blado G G 1996 *Int*. *J*. *Quan*. *Chem*. **58** 431

[26] Qiau S W et al 2002 *Commun*. *Theor*. *Phys*. **38** 139

[27] Chen G 2004 *Chin*. *Phys*. **13** 144

[28] Vaidya A N and Boschi H 1991 *J*. *Math*. *Phys*. **31** 1951

[29] Chen C Y，Liu C L and Sun D S 2002 *Phys*. *Lett*. A **305** 341

[30] Chen C Y，Sun D S and Liu C L 2003 *Phys*. *Lett*. A **317** 80

[31] 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)]

Bound states solutions of the Klein-Gordon equation with Hartmann potential and recursion relations

Chen Zi-Dong Chen Gang

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

(Received 5 November 2004)

Abstract

The bound state solutions of the Klein-Gordon equation are obtained. When Hartmann-type scalar and vector potentials are equal. It is shown that the radial and angular wave functions are respectively expressed by confluent hypergeogetric and hypergeogetric functions. In addition, two kinds of recursion relations of radial wave functions for given ‘principal’ and ‘angular-momentum’ quantum numbers are also derived.

Keywords: Hartmann potential, Klein-Gordon equation, bound state, recursion relatoon

PACC: 0365