第 55 卷 第 12 期 2006 年 12 月
1000-3290/2006/55(12)/6229-05

物 理 学 报
ACTA PHYSICA SINICA

Vol.55,No.12,December,2006

Makarov 势的 Dirac 方程的束缚态解

张民仓† 王振邦

(陕西师范大学物理学与信息技术学院,西安 710062)

(2006 年 4 月 11 日收到;2006 年 8 月 8 日收到修改稿)

给出了 Makarov 型标量势与矢量势相等条件下的 Dirac 方程的束缚态解. Dirac 方程的角向方程用因子分解方法求解,在得出角向波函数的过程中,自然地得到了属于同一本征值的不同角向波函数间的递推操作. 径向束缚态波函数用合流超几何函数表示,束缚态的能量方程可由径向波函数满足的边界条件得到.

关键词:Makarov 势,Dirac 方程,束缚态,因子分解方法

PACC:0365

1. 引 言

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.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[1,2].在以前的研究中,人们已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—14].这些势函数的大多数属于双原子分子势.

非中心势是另一类重要的势函数,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,粒子在非中心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.这些研究包括环形非球谐振子(ring-shaped non-spherical harmonic oscillator)势[15,16]、Hartmann 势[17,18]、非球谐振子(non-spherical harmonic oscillator)势[19,20]、双环形球谐振子(double ring-shaped harmonic oscillator)势[21]等等.在研究环状分子的模型时 Makarov 等[22]曾提出了另一种重要的非中心势,其表达式为

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

式中 μ,β 和 γ 是无量纲的实参数. 在非相对论量子力学的范围内,对 Makarov 势已有过较多的研究[23,24].本文考虑粒子在 Makarov 势场中的相对论效应,在 Makarov 型标量势与矢量势相等的条件下,给出 Dirac 方程的束缚态解,尤其是对 Dirac 方程的角向方程采用因子分解方法求解,避免了通常使用级数展开法时数学过程的繁冗,角向波函数的归一化十分简洁,在得出角向波函数的同时自然地给出了角向波函数间的递推操作.

2. Makarov 势的 Dirac 方程

具有标量势 $S(r)$ 与矢量势 $V(r)$ 的 Dirac 方程为

$$\begin{aligned}&[c\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p} + \beta(Mc^2 + S(\boldsymbol{r}))]\psi(\boldsymbol{r})\\ &= [E - V(\boldsymbol{r})]\psi(\boldsymbol{r}),\end{aligned} \tag{2}$$

式中,

$$\begin{aligned}\boldsymbol{p} &= -\mathrm{i}\hbar\nabla,\\ \boldsymbol{\alpha} &= \begin{pmatrix}0 & \boldsymbol{\sigma}\\ \boldsymbol{\sigma} & 0\end{pmatrix},\\ \beta &= \begin{pmatrix}I & 0\\ 0 & -I\end{pmatrix},\end{aligned} \tag{3}$$

其中 $\boldsymbol{\sigma}$ 为 Pauli 自旋矩阵.在 Pauli-Dirac 表象中,使得

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \begin{pmatrix}\varphi(\boldsymbol{r})\\ \chi(\boldsymbol{r})\end{pmatrix}, \tag{4}$$

于是有

$$c\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}\chi(\boldsymbol{r}) = [E - V(\boldsymbol{r}) - Mc^2 - S(\boldsymbol{r})]\varphi(\boldsymbol{r}), \tag{5a}$$

$$c\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}\varphi(\boldsymbol{r}) = [E - V(\boldsymbol{r}) + Mc^2 + S(\boldsymbol{r})]\chi(\boldsymbol{r}). \tag{5b}$$

† E-mail:mincangzhang@snnu.edu.cn

当标量势 $S(r)$ 与矢量势 $V(r)$ 相等时,方程(5)变为

$$c\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}\chi(\boldsymbol{r}) = [E - Mc^2 - 2V(\boldsymbol{r})]\varphi(\boldsymbol{r}), \tag{6a}$$

$$\chi(\boldsymbol{r}) = \frac{c\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}}{E + Mc^2}\varphi(\boldsymbol{r}). \tag{6b}$$

把方程(6b)代入方程(6a)并引入 Makarov 势函数,可得

$$\Big[-\hbar^2c^2\nabla^2 + 2(E + Mc^2)\times\Big(\frac{\mu}{r} + \frac{\beta}{r^2\sin^2\theta} + \frac{\gamma\cos\theta}{r^2\sin^2\theta}\Big)\Big]\varphi(\boldsymbol{r}) = [E^2 - M^2c^4]\varphi(\boldsymbol{r}). \tag{7}$$

在球坐标下,取

$$\varphi(\boldsymbol{r}) = r^{-1}u(r)H(\theta)\exp(\mathrm{i}m\phi) \quad (m = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots). \tag{8}$$

把(8)式代入方程(7)并分离变量,有

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\Big(\sin\theta\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\Big)H(\theta) - \left[\frac{m^2 + \frac{2(E + Mc^2)(\beta + \gamma\cos\theta)}{\hbar^2c^2}}{\sin^2\theta}\right]H(\theta) + \lambda H(\theta) = 0, \tag{9}$$

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}u(r) - \Big[\frac{\lambda}{r^2} + \frac{2(E + Mc^2)\mu}{\hbar^2c^2r} + \frac{(M^2c^4 - E^2)}{\hbar^2c^2}\Big]u(r) = 0. \tag{10}$$

方程(9)和(10)为相等的 Makarov 型标量势与矢量势的 Dirac 方程的 θ 角向方程和径向方程,λ 为分离常数.

3. Makarov 势的 Dirac 方程的 θ 角向方程解

我们对角向方程(9)采用因子分解方法求解.对于具有本征值问题的方程求解,使用因子分解方法有着诸多的优点[25,26].作变换

$$Y(\theta) = \sin^{1/2}\theta H(\theta), \tag{11}$$

把(11)式代入方程(9),有

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}Y(\theta) - \left[\frac{m^2 - \frac{1}{4} + \frac{2(E + Mc^2)}{\hbar^2c^2}\beta + \frac{2(E + Mc^2)}{\hbar^2c^2}\gamma\cos\theta}{\sin^2\theta}\right]\times Y(\theta) + \Big(\lambda + \frac{1}{4}\Big)Y(\theta) = 0. \tag{12}$$

可以看出,方程(12)中的势函数具有 A 型因子分解的特征.与 A 型因子分解的普遍表达式相比,只须取

$$\begin{aligned} a &= 1\\ C &= -\frac{1}{2},\\ p &= 0,\\ d &= \sqrt{\frac{2(E + Mc^2)}{\hbar^2c^2}}\beta,\\ \gamma &= m\sqrt{\frac{2\hbar^2c^2\beta}{E + Mc^2}},\\ x &= \theta. \end{aligned} \tag{13}$$

方程(12)的因子分解为

$$k(\theta, m) = \Big(m - \frac{1}{2}\Big)\cot\theta + d/\sin\theta, \tag{14}$$

$$L(m) = \Big(m - \frac{1}{2}\Big)^2. \tag{15}$$

由于 $L(m)$ 是 m 的递增函数,因而方程(12)属于 A 型因子分解的第 Ⅰ 类问题,于是得到

$$\lambda = l(l + 1) \qquad (l = 0, 1, 2, \cdots \geqslant m). \tag{16}$$

方程(12)的解为

$$Y_l^l(\theta) = D\exp\Big(\int k(\theta, l + 1)\mathrm{d}\theta\Big), \tag{17}$$

式中 D 为常数,并且

$$k(\theta, l + 1) = \Big(l + \frac{1}{2}\Big)\cot\theta + d/\sin\theta. \tag{18}$$

由(17),(18)式可得

$$Y_l^l(\theta) = D'\sin^{\left(l + \frac{1}{2} + d\right)}\frac{\theta}{2}\cos^{\left(l + \frac{1}{2} - d\right)}\frac{\theta}{2}, \tag{19}$$

$$D' = 2D. \tag{20}$$

归一化常数 D' 可由下式求得:

$$\int_0^{\pi}[Y_l^l(\theta)]^2\mathrm{d}\theta = 1. \tag{21}$$

方程(12)的归一化解为

$$Y_l^l(\theta) = \Big[\frac{\Gamma(2l + 2)}{\Gamma(l + d + 1)\Gamma(l - d + 1)}\Big]^{1/2}\times\sin^{\left(l + \frac{1}{2} + d\right)}\frac{\theta}{2}\cos^{\left(l + \frac{1}{2} - d\right)}\frac{\theta}{2}. \tag{22}$$

$Y_l^l(\theta)$ 是对应于本征值为 $\lambda = l(l + 1)$,且 m 取最大值 l 的波函数,显然 $Y_l^l(\theta)$ 满足方程(12)具有束缚态解的边界条件 $Y(\theta)|_{\theta=0} = 0, Y(\theta)|_{\theta=\pi} = 0$.属于本征值 $\lambda = l(l + 1)$ 的阶梯函数的全部为 $Y_l^0, Y_l^1, Y_l^2, \cdots, Y_l^l$,其中

$$Y_l^{m-1}(\theta) = [(l + m)(l + 1 - m)]^{-1/2}\times\Big[\Big(m - \frac{1}{2}\Big)\cot\theta + \frac{d}{\sin\theta} + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\Big]Y_l^m(\theta). \tag{23}$$

可以证明,当 m 取负值时,有下列关系式成立:

$$Y_l^{-m}(\theta) = (-1)^m Y_l^m(\theta). \tag{24}$$

最后，由(11)式得到

$$H_{lm}(\theta) = (\sin\theta)^{-1/2} Y_l^m(\theta). \tag{25}$$

4. Makarov 势的 Dirac 方程的径向方程解

在径向方程(10)中，设

$$t = \frac{2(E+Mc^2)\mu}{\hbar^2 c^2 s},$$
$$\rho = sr, \tag{26}$$
$$s = \frac{2(M^2c^4 - E^2)^{1/2}}{\hbar c},$$

并代入(16)式，则径向方程(10)变为

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2}u(\rho) - \left[\frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{t}{\rho} + \frac{1}{4}\right]u(\rho) = 0. \tag{27}$$

方程(27)具有束缚态解的边界条件为 $u(0)=0$，$u(\infty)=0$，考虑到其解在 $\rho=0$ 和 $\rho=\infty$ 处的渐进行为，可设

$$u(\rho) = \rho^{l+1}\exp\left(-\frac{\rho}{2}\right)f(\rho). \tag{28}$$

把(28)式代入方程(27)，可得

$$\rho\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2}f(\rho) + [2(l+1) - \rho]\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}f(\rho) - (l+1-t)f(\rho) = 0. \tag{29}$$

方程(29)为合流超几何方程，其解可用合流超几何函数表示为

$$f(\rho) = \mathrm{F}(l+1-t, 2l+2, \rho). \tag{30}$$

当 $\rho\to\infty$ 时，合流超几何函数 $\mathrm{F}(l+1-t,2l+2,\rho)\to\exp(\rho)$. 由(28)式可以看出，在 $\rho\to\infty$ 时，$u(\rho)$ 以 $\exp(\rho/2)$ 的行为指数地发散，因此合流超几何函数必须中断为一多项式，即要求

$$l+1-t = -n_r \quad (n_r = 0,1,2,\cdots), \tag{31}$$

式中 n_r 为径向量子数. 若取

$$t = n_r + l + 1 = n \quad (n = 0,1,2,\cdots), \tag{32}$$

n 为在通常意义下的主量子数. 由(26)，(31)和(32)式可以得到束缚态满足的能量方程为

$$E = Mc^2\left(\frac{n^2\hbar^2c^2 - \mu^2}{n^2\hbar^2c^2 + \mu^2}\right). \tag{33}$$

相应地，径向束缚态波函数为(未归一化)

$$u_{nl}(r) = \left(\frac{2(E+Mc^2)\mu r}{n\hbar^2c^2}\right)^{l+1} \times \exp\left(-\frac{(E+Mc^2)\mu r}{n\hbar^2c^2}\right) \times \mathrm{F}\left(-n_r, 2l+2, \frac{2(E+Mc^2)\mu r}{n\hbar^2c^2}\right). \tag{34}$$

最后，我们得到 Makarov 势的 Dirac 方程的旋量波函数

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \begin{pmatrix}\varphi(\boldsymbol{r})\\ \chi(\boldsymbol{r})\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}1\\ \dfrac{c\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}}{E+Mc^2}\end{pmatrix} r^{-1}u_{nl}(r)H_{lm}(\theta)\exp(\mathrm{i}m\phi). \tag{35}$$

5. 讨　论

综上所述，在标量势与矢量势相等条件下，Makarov 势的 Dirac 方程的束缚态解可以严格地求出. Dirac 方程的角向部分可以采用因子分解方法求解，Dirac 方程的径向束缚态波函数可用合流超几何函数表示，束缚态满足的能量方程可由径向波函数满足的边界条件得到. Makarov 势是一种典型的非中心势，由其表达式(1)可看出，当 $\gamma=0$，$\mu=-\eta\sigma^2e^2$ 及 $\beta=\frac{q\eta^2\sigma^2\hbar^2}{2M}$ 时，Makarov 势退化为 Hartmann 势. 当 $\gamma=0$，$\beta=0$，$\mu=-ze^2$ 时，Makarov 势退化为库仑势. 因而在标量势与矢量势相等的条件下，对于 Hartmann 势和库仑势的 Dirac 方程的讨论都可以作为 Makarov 势 Dirac 方程的特殊情况. 但是当标量势大于矢量势时，库仑势的 Dirac 方程也存在束缚态[27,28].

在以前的工作中，人们已在标量势等于矢量势的条件下，给出了一些非中心势的 Klein-Gordon 方程或 Dirac 方程的束缚态解，其研究方法包括了级数展开法[15,16,18—20]、Laplace 变换法[17]、超对称和形式不变性法[21]等等. 这些方法一般是通过适当的变量代换，把非中心势的 Klein-Gordon 方程或 Dirac 方程的角向方程变为关联勒让德方程、合流超几何方程或超几何方程，角向波函数用相应的特殊函数表示，波函数的归一化常数由特殊函数的正交性及递推关系求出，数学过程比较繁冗，角向波函数间的递推关系也不易导出. 本文对 Dirac 方程的角向方程采用因子分解方法求解. 原理上，因子分解方法是算子操作过程，它使得角向波函数满足的二阶微分方程退化为一阶微分方程. 确定了方程中势函数的因子分解形式及类型后，便可直接给出满足边界条件的角向束缚态波函数，在得出角向波函数的同时，自然得

到了属于同一本征值的不同角向波函数间的递推操作. 由于波函数是用初等函数表示,归一化过程也相对简单. 因子分解方法可广泛地应用于物理学研究中的本征值问题,随着问题的不同,这一方法会显示出其独特的方便之处.

[1] Wang R C, Wang C Y 1988 *Phys*. *Rev*. D **38** 348

[2] Zeng J Y 2000 *Quantum Mechanics* (Vol Ⅱ) (3rd ed) (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] Hu S Z, 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] Guo J Y, Meng J, Xu F X 2003 *Chin*. *Phys*. *Lett*. **20** 602

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

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

[8] Zhang M C, Wang Z B 2006 *Acta Phys*. *Sin*. **55** 525 (in Chinese) [张民仓、王振邦 2006 物理学报 **55** 525]

[9] Chen G 2004 *Acta Phys*. *Sin*. **53** 680 (in Chinese) [陈 刚 2004 物理学报 **53** 680]

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

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

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

[13] Sharma L K, Fiase J 2004 *Chin*. *Phys*. *Lett*. **21** 1983

[14] Zhang M C, Wang Z B 2006 *Acta Phys*. *Sin*. **55** 521 (in Chinese) [张民仓、王振邦 2006 物理学报 **55** 521]

[15] Lu F L, Chen C Y 2004 *Acta Phys*. *Sin*. **53** 1652 (in Chinese) [陆法林、陈昌远 2004 物理学报 **53** 1652]

[16] Zhang X A, Chen K, Duan Z L 2005 *Chin*. *Phys*. **14** 42

[17] Chen Z D, Chen G 2005 *Acta Phys*. *Sin*. **54** 2524 (in Chinese) [陈子栋、陈 刚 2005 物理学报 **54** 2524]

[18] Chen C Y 2005 *Phys*. *Lett*. A **339** 283

[19] Li N, Ju G X, Ren Z Z 2005 *Acta Phys*. *Sin*. **54** 2520 (in Chinese) [李 宁、鞠国兴、任中洲 2005 物理学报 **54** 2520]

[20] Zhang M C, Wang Z B 2005 *Chin*. *Phys*. *Lett*. **22** 2994

[21] Lu F L, Chen C Y, Sun D S 2005 *Chin*. *Phys*. **14** 463

[22] Makarov A A, Smorodinsky J A, Valiev K H *et al* 1967 *Nuovo Cimento* A **52** 1061

[23] Gönül B, Zorba İ 2000 *Phys*. *Lett*. A **269** 83

[24] Yaşuk F, Berkdemir C, Berkdemir A 2005 *J*. *Phys*. *A*: *Math*. *Gen*. **38** 6579

[25] Infeld I 1941 *Phys*. *Rev*. **59** 737

[26] Infeld I, Hull T E 1951 *Rev*. *Mod*. *Phys*. **23** 21

[27] Ran Z Q, Xue L H, Hu S Z 2002 *Acta Phys*. *Sin*. **51** 2453 (in Chinese) [冉扬强、薛立徽、胡嗣柱 2002 物理学报 **51** 2435]

[28] Chen C Y, Liu C L, Lu F L *et al* 2003 *Acta Phys*. *Sin*. **52** 1579 (in Chinese) [陈昌远、刘成林、陆法林等 2003 物理学报 **52** 1579]

Bound state solutions of the Dirac equation with the Makarov potentials

Zhang Min-Cang† Wang Zhen-Bang

(*School of Physics and Information Technology*, *Shaanxi Normal University*, *Xi'an* 710062, *China*)

(Received 11 April 2006; revised manuscript received 8 August 2006)

Abstract

The bound state solutions of the Dirac equation with equal scalar and vector Makarov potentials are obtained. It is shown that angular component of the Dirac equation can be solved with the factorization method, which enables us to find immediately the eigenvalues and at the same time the manipulation process for the normalized eigenfunctions. The radial bound state solutions are expressed in terms of the confluent hypergeometric functions and the energy equation is derived from the boundary condition satisfied by the radial wavefunctions.

Keywords: Makarov potential, Dirac equation, bound state, factorization method

PACC: 0365

† E-mail: mincangzhang@snnu.edu.cn