

分区级数解法在二维 Dirac 方程中的应用*

孙松阳^{1)†} 朱嘉麟²⁾

1) (长春理工大学物理学院, 长春 130022)

2) (清华大学物理系, 北京 100084)

(2025 年 3 月 8 日收到; 2025 年 5 月 14 日收到修改稿)

随着石墨烯等二维材料的发现, 相对论二维 Dirac 方程越来越受到研究者的关注, 准确求解电磁场中的 Dirac 方程是研究和调控 Dirac 电子量子状态的基础. 通过将分区级数方法应用到 Dirac 方程中并对该方程在正则区、泰勒区和非正则区进行级数展开, Dirac 电子束缚态的普适性判据被推导出来, 束缚态的能级和波函数被计算出来. 用该方法计算有质量 Dirac 电子在库仑电势下 (相对论二维类氢原子) 的能级和波函数并与解析解进行比较, 结果表明该方法具有非常高的准确性. 对均匀磁场和线性电势下 Dirac 电子态的计算结果表明, 该方法对于复杂电磁场中 Dirac 方程的求解具有普遍的适用性. 用该方法研究了均匀磁场 B 和线性电势 $V = Fr$ 下 Dirac 电子束缚态随着电势强度的变化, 负能态的能级序列变化被观察到, 在临界处 $F = 0.5B$, 正能态的束缚态仍然存在, 而只有能量超过 0 的少数负能态的束缚态才存在. 该方法提供了求解 Dirac 方程的有效工具并丰富了人们对相对论量子力学的认识.

关键词: Dirac 方程, 分区级数解法, 束缚态, 相对论二维类氢原子**PACS:** 03.65.Ge, 02.30.Hq, 02.30.Mv, 03.65.-w**DOI:** 10.7498/aps.74.20250302**CSTR:** 32037.14.aps.74.20250302

1 引言

2004 年石墨烯被发现, 其色散关系是线性的, 电子的有效质量方程满足二维 Dirac 方程^[1,2]. 硅烯、锗烯等更多具有线性色散关系的二维体系 (Dirac 材料) 也被发现^[3-5]. Dirac 材料的电子具有相对论的量子特性, 为研究量子电动力学提供了平台, 半整数量子霍尔效应、Klein 隧穿效应等现象都被证实^[6,7]. 这些材料的高电子迁移率、长自由程等特性也备受青睐^[8]. 如何求解不同电磁场下的 Dirac 方程成了研究者们关注的重要对象^[9-14].

二维 Dirac 方程是一阶耦合微分方程组, 其求解比薛定谔方程更加困难^[9]. 只有在均匀磁场、氢原子等极少数情况下该方程有解析解, 一般电磁场

下不存在解析解^[10]. 研究者们开发了 Dirac 方程的数值解法, 如对角化法、B 样条函数法和差分法^[11-14]. 它们在准确度或通用性上具有局限性, 在非缓变势下无法给出准确的物理图像^[13,14]. 分区级数解法由于考虑不同区间解的性质, 最大程度地使用解析处理, 能够给出复杂电磁场下薛定谔方程的准确解, 在量子点 (环) 等电子态研究中发挥了重要作用^[15]. 基于分区级数的原理, Zhu 等^[15]将 Dirac 方程通过去耦合转化为类似薛定谔方程的形式, 获得了库仑电势和均匀磁场下的解, 但由于去耦合导致附加奇点出现, 只能给出正能态. 本文将对耦合的 Dirac 方程直接进行级数展开, 从而避免附加奇点, 获得全面的能谱结构. 在推导过程中获得了 Dirac 电子形成束缚态的判据, 并通过计算相对论二维氢原子以及均匀磁场和线性电势下的 Dirac 电子态

* 吉林省教育厅科学研究项目 (批准号: JJKH20250474KJ) 和吉林省高教科研重点项目 (批准号: JGJX24B10) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: sunsongyang@cust.edu.cn

证实该方法的准确性和通用性.

2 分区级数解法

2.1 二维 Dirac 电子的哈密顿模型

石墨烯、硅烯等二维材料在 Dirac 锥附近的电子可看作相对论性的 Dirac 电子, 满足 Dirac 方程. 电子的哈密顿量形式如下 [16]:

$$H^T = v_F \sigma_x (P_x + eA_x) + \tau v_F \sigma_y (P_y + eA_y) + M\sigma_z + \mathbf{I}V_e, \quad (1)$$

其中, v_F 是费米速度, P_x 和 P_y 是动量算符, σ_x , σ_y 和 σ_z 是 Pauli 矩阵, $\mathbf{I}$ 是二维单位矩阵, $\mathbf{A}$ 是磁矢势, M 是质量场, V_e 是外加电场, $\tau = +1(-1)$ 代表 $K(K')$ 谷. 在平面极坐标系下, 采用磁场规范 $\mathbf{A} = A_\theta \mathbf{e}_\theta$, 并视电场和质量场为中心场, 其形式分别为 $V_e = V_e(r)$ 和 $M = M(r)$. 设 ψ 是 $\mathbf{H}$ 对应的波函数, 满足 $\mathbf{H}\psi = E\psi$, 其是两分量的形式, 上下分量分别代表二维六边形蜂窝状晶格结构中 AB 两套子格子上的包迹波函数. 采用分离变量法, 将波函数记为 $\psi = (R_A e^{il\theta}, iR_B e^{i(l+1)\theta})/r^{0.5}$, 其中 i 是虚数单位, l 是角动量量子数. 将长度和能量单位分别设为 $a_0 = [\hbar/(e/B_0)]^{0.5}$ 和 $E_0 = \hbar v_F/a_0$. 令 $B_0 = 1$ T, 则 $a_0 = 25.656$ nm. 如果费米速度 $v_F \approx 10^6$ m/s, $E_0 = 25.656$ meV. 将 (1) 式中的哈密顿量代入 $\mathbf{H}\psi = E\psi$, 得到关于径向波函数的方程:

$$\begin{cases} \left[\left(\frac{d}{dr} + \tau \frac{j}{r} \right) + \tau A_\theta \right] R_B = (E - M - V_e) R_A, \\ \left[\left(\frac{d}{dr} - \tau \frac{j}{r} \right) - \tau A_\theta \right] R_A = -(E + M - V_e) R_B, \end{cases} \quad (2)$$

(2) 式中, $j = l + 1/2$ 是总角动量量子数. 根据级数理论, 将磁矢势 A_θ 展开为级数形式, 并将 (2) 式中的 $\tau j/r$ 作为 -1 次幂项与 A_θ 合并为 A . (2) 式等号右端的能量 E 是未知的, 其与电势 V_e 地位相同, 把 $-E$ 作为 0 次幂与 V_e 合并为 V . 可将 A , M 和 V 写成:

$$\begin{aligned} A &= \tau \frac{j}{r} + \tau A_\theta = \sum_{i=-1}^{I_1} A_i r^i, \quad M = \sum_{i=0}^{I_2} m_i r^i, \\ V &= -E + V_e = \sum_{i=-1}^{I_3} v_i r^i, \end{aligned} \quad (3)$$

式中, I_1 , I_2 和 I_3 分别是磁矢势、质量场和电势级数展开的最高次幂. 质量一般为常数, 但在二维材

料中质量也有随空间变化的情形, 此外相对论量子力学中的标量势 $S(r)$ 与质量的地位相同 [17]. 一般而言, A 的最低次幂是 -1 , M 的最低次幂是 0 , V 的最低次幂是 -1 (库仑电势 $\propto r^{-1}$, 是最低次幂的电势). 简化 (2) 式可得

$$\begin{cases} \left[\frac{d}{dr} + A \right] R_B = (-M - V) R_A, \\ \left[\frac{d}{dr} - A \right] R_A = -(M - V) R_B. \end{cases} \quad (4)$$

2.2 分区级数原理

物理学家们运用级数解法获得了薛定谔方程下的氢原子、谐振子等问题的解析解, 推动了量子力学的发展. 对于复杂势场, 它们的径向方程无法在全区间以统一的级数形式展开或化为合流超几何方程从而得到解析解. 然而, 级数解法思想仍然广泛应用 [18]. 如图 1 所示, 通过分析薛定谔方程在正则奇点、常点和非正则奇点的性质, 将方程的解在正则区 (正则奇点附近)、泰勒区 (常点附近) 和非正则区 (非正则奇点至无穷远处) 进行级数展开, 利用连接条件得到本征能量及对应的波函数 [15]. 与薛定谔方程不同, Dirac 方程 (4) 是耦合的微分方程组, 波函数具有二分量形式. 先把方程 (4) 去耦合, 得到两个独立、含有本征能量的二阶微分方程:

$$\left[W^+(r) \frac{d^2}{dr^2} + P^+(r) \frac{d}{dr} + Q^+(r) \right] R_A = 0, \quad (5a)$$

$$\left[W^-(r) \frac{d^2}{dr^2} + P^-(r) \frac{d}{dr} + Q^-(r) \right] R_B = 0, \quad (5b)$$

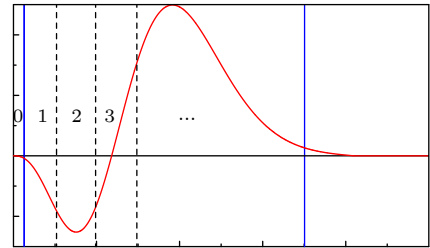


图 1 分区级数解法示意图, 径向波函数在不同区间分别用级数精确表示出来, 第 0 个区间是正则区 (regular region), 最后是非正则区 (irregular region), 中间都是泰勒区 (Taylor region)

Fig. 1. The sketch of the sectioned series expansion method, the radial wavefunction is exactly expressed by different series expansions in separate regions: The zeroth region is regular one, the last is irregular one and others between them are Taylor ones.

$$W^\pm = M \mp V = \sum_{i=-1}^{K_1} w_i^\pm r^i, \quad (5c)$$

$$P^\pm = -\left(\frac{dM}{dr} \mp \frac{dV}{dr}\right) = \sum_{i=-2}^{K_2} p_i^\pm r^i, \quad (5d)$$

$$Q^\pm = -\frac{dA}{dr}(M \mp V) \pm A\left(\frac{dM}{dr} \mp \frac{dV}{dr}\right) - (M \mp V) \\ \times (A^2 + M^2 - V^2) = \sum_{i=0}^{K_3} q_i^\pm r^i. \quad (5e)$$

(5c) 式中 K_1 是方程 (3) 中 I_2 和 I_3 的最大值, 即 $K_1 = \max(I_2, I_3)$, (5d) 式中 $K_2 = K_1 - 1$, (5e) 式中 $K_3 = \max(2I_1, 2I_2, 2I_3) + K_1$. 不同于薛定谔方程, 方程 (5) 各项前面的表达式更加复杂^[14].

对于束缚态波函数而言, 方程 (4) 有正则奇点 $r = 0$ 和非正则奇点 $r = \infty$, 但去耦合可能会导致 (5a) 式和 (5b) 式产生附加奇点 (它们是 (5) 式中 $W = 0$ 的根). $r = 0$ 的邻域 $[0, r_0]$ 是正则区间, 其中 r_0 的取值要保证该区间的收敛性. 如果波函数在某处接近于 0 且从该处到无穷远处波函数呈现

出一直衰减到 0 的趋势, 可以将此位置记为 r_∞ , $[r_\infty, \infty]$ 是实际计算的非正则区间. 如果对 (5a) 式和 (5b) 式进行级数展开, 附加奇点会给方程的级数展开带来更多的困难和不稳定性^[19]. 但方程 (4) 在 $[r_0, r_\infty]$ 之间不存在奇点, 因此在 $[0, r_0]$ 和 $[r_0, r_\infty]$ 区间可以直接对 (4) 式的两个分量同时进行级数展开, 而不必考虑附加奇点的影响.

2.3 正则区间 $[0, r_0]$ 的级数形式

以 $r = 0$ 为展开点, 在区间 $[0, r_0]$ 方程 (4) 的两分量有正则解, 其级数形式为

$$\begin{pmatrix} R_A(r) \\ R_B(r) \end{pmatrix} = H \sum_{n=0}^{\infty} r^n \begin{pmatrix} r^{\rho_a} a_n \\ r^{\rho_b} b_n \end{pmatrix}, \quad (6)$$

其中 ρ_a, ρ_b 是正则解上下分量的指标, H 是待定常数, a_n, b_n 分别是上下分量级数展开中第 n 阶项前面的系数. 为找出 ρ_a, ρ_b 及 a_n, b_n 之间的递推关系, 不妨让 $a_0 = 1$ 或 $b_0 = 1$. 将 (6) 式和方程 (3) 中 A, M 和 V 的多项式形式代入方程 (4), 可得到

$$\begin{cases} \left[\frac{d}{dr} + \sum_{i=-1}^{I_1} A_i r^i \right] r^{\rho_b} \sum_{n=0}^{\infty} b_n r^n = \left(-\sum_{i=0}^{I_2} m_i r^i - \sum_{i=-1}^{I_3} v_i r^i \right) r^{\rho_a} \sum_{n=0}^{\infty} a_n r^n, \\ \left[\frac{d}{dr} - \sum_{i=-1}^{I_1} A_i r^i \right] r^{\rho_a} \sum_{n=0}^{\infty} a_n r^n = -\left(\sum_{i=0}^{I_2} m_i r^i - \sum_{i=-1}^{I_3} v_i r^i \right) r^{\rho_b} \sum_{n=0}^{\infty} b_n r^n, \end{cases} \quad (7)$$

进行求导运算并将方程 (7) 等号左端形式相同的项写在一起, 可得

$$\begin{cases} \left[\left(\sum_{n=0}^{\infty} (\rho_b + n) b_n r^{\rho_b+n-1} + A_{-1} \sum_{n=0}^{\infty} b_n r^{\rho_b+n-1} \right) + \sum_{i=0}^{I_1} A_i r^i \sum_{n=0}^{\infty} b_n r^{\rho_b+n} \right] \\ = \left[-\sum_{i=0}^{I_2} m_i r^i \sum_{n=0}^{\infty} a_n r^{\rho_a+n} - \sum_{i=-1}^{I_3} v_i r^i \sum_{n=0}^{\infty} a_n r^{\rho_a+n} \right], \\ \left[\left(\sum_{n=0}^{\infty} (\rho_a + n) a_n r^{\rho_a+n-1} - A_{-1} \sum_{n=0}^{\infty} a_n r^{\rho_a+n-1} \right) - \sum_{i=0}^{I_1} A_i r^i \sum_{n=0}^{\infty} a_n r^{\rho_a+n} \right] \\ = -\left[\sum_{i=0}^{I_2} m_i r^i \sum_{n=0}^{\infty} b_n r^{\rho_b+n} - \sum_{i=-1}^{I_3} v_i r^i \sum_{n=0}^{\infty} b_n r^{\rho_b+n} \right]. \end{cases} \quad (8)$$

为找到 ρ_a, ρ_b 满足的指标方程, 需要找到方程 (8) 等号两端最低次幂的关系. 方程 (8) 等号左端最低次幂分别是 $(\rho_b + A_{-1})b_0 r^{\rho_b-1}$ 和 $(\rho_a - A_{-1})a_0 r^{\rho_a-1}$, 等号右端最低次幂则取决于 v_{-1} 是否为 0 (电势中是否包含库仑势), 下文分两种情况讨论.

2.3.1 $v_{-1} \neq 0$ 时正则区的指标和递推关系

第 1 种情况是 $v_{-1} \neq 0$ (电势中包含库仑势), 由方程 (8) 两端 r 的最低次幂前面的系数相等, 从而得到指标方程^[20]:

$$\begin{cases} (\rho_b + A_{-1})b_0 = -v_{-1}a_0, \\ (\rho_a - A_{-1})a_0 = v_{-1}b_0. \end{cases} \quad (9)$$

方程 (9) 具有非平庸解, 可得到正则区间的指标为

$$\rho = \rho_b = \rho_a = \sqrt{A_{-1}^2 - v_{-1}^2}. \quad (10)$$

如果令 $a_0 = 1$, 还可从 (9) 式得到 b_0 . 为了便于推导, 写成矩阵形式:

$$\begin{pmatrix} a_0 \\ b_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ -v_{-1}/(\rho + A_{-1}) \end{pmatrix}. \quad (11)$$

为找到方程 (8) 中系数的递推关系, 对方程 (8) 指标进行变换, 可得到:

$$\begin{cases} \left[\sum_{n=0}^{\infty} (\rho + n)b_n r^{n-1} + \sum_{n=-1}^{\infty} \sum_{i=-1}^{\min(I_1, n)} A_i b_{n-i} r^n \right] = \left[- \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{i=0}^{\min(I_2, n)} m_i a_{n-i} r^n - \sum_{n=-1}^{\infty} \sum_{i=-1}^{\min(I_3, n)} v_i a_{n-i} r^n \right], \\ \left[\sum_{n=0}^{\infty} (\rho + n)a_n r^{n-1} - \sum_{n=-1}^{\infty} \sum_{i=-1}^{\min(I_1, n)} A_i a_{n-i} r^n \right] = - \left[\sum_{n=0}^{\infty} \sum_{i=0}^{\min(I_2, n)} m_i b_{n-i} r^n - \sum_{n=-1}^{\infty} \sum_{i=-1}^{\min(I_3, n)} v_i b_{n-i} r^n \right]. \end{cases} \quad (12)$$

让方程 (12) 中每个等式两端的 r^n 前面的系数相等, 可得到:

$$\begin{cases} (\rho + n + 1 + A_{-1})b_{n+1} + \sum_{i=0}^{\min(I_1, n)} A_i b_{n-i} = \left[- \sum_{i=0}^{\min(I_2, n)} m_i a_{n-i} - \sum_{i=0}^{\min(I_3, n)} v_i a_{n-i} - v_{-1}a_{n+1} \right], \\ (\rho + n + 1 - A_{-1})a_{n+1} - \sum_{i=0}^{\min(I_1, n)} A_i a_{n-i} = \left[- \sum_{i=0}^{\min(I_2, n)} m_i b_{n-i} + \sum_{i=0}^{\min(I_3, n)} v_i b_{n-i} + v_{-1}b_{n+1} \right], \end{cases} \quad (13)$$

其中的 $\min(x, y)$ 表示 x 与 y 的最小值. 整理方程 (13), 得到系数之间的递推关系为

$$\begin{pmatrix} a_{n+1} \\ b_{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_{-1} & \rho + n + 1 + A_{-1} \\ \rho + n + 1 - A_{-1} & -v_{-1} \end{pmatrix}^{-1} \cdot \left[\sum_{k=0}^{\min(n, I_1)} \begin{pmatrix} 0 & -A_k \\ A_k & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{n-k} \\ b_{n-k} \end{pmatrix} \right. \\ \left. + \sum_{k=0}^{\min(n, I_2)} \begin{pmatrix} -m_k & 0 \\ 0 & -m_k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{n-k} \\ b_{n-k} \end{pmatrix} + \sum_{k=0}^{\min(n, I_3)} \begin{pmatrix} -v_k & 0 \\ 0 & v_k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{n-k} \\ b_{n-k} \end{pmatrix} \right]. \quad (14)$$

2.3.2 $v_{-1} = 0$ 时正则区的指标和递推关系

第 2 种情况是 $v_{-1} = 0$ (电势中不包含库仑势), 此时 v_0 由于包含能量 E , 该项一般不等于 0. 方程 (8) 等号右端上下方程的最低次幂分别是 $-(m_0 + v_0)a_0 r^{\rho_a}$ 和 $-(m_0 - v_0)b_0 r^{\rho_b}$, 而方程 (8) 等号左端上下方程的最低次幂分别是 $(\rho_b + A_{-1})b_0 r^{\rho_b-1}$ 和 $(\rho_a - A_{-1})a_0 r^{\rho_a-1}$. 如果使 $-(m_0 + v_0)a_0 r^{\rho_a}$ 和 $(\rho_b + A_{-1})b_0 r^{\rho_b-1}$ 相等, 则 $\rho_b - 1 = \rho_a$ 且 $\rho_a = A_{-1}$; 如果使 $-(m_0 - v_0)b_0 r^{\rho_b}$ 和 $(\rho_a - A_{-1})a_0 r^{\rho_a-1}$ 相等, 则 $\rho_a - 1 = \rho_b$ 且 $\rho_b = -A_{-1}$. 指标 ρ_a 和 ρ_b 必须非负, 波函数才有意义, 再分两种情况讨论.

1) 当 $A_{-1} \geq 0$ 时, $\rho_a = A_{-1} = \rho$, $\rho_b = \rho_a + 1$. 如果令 $a_0 = 1$, 则由 $-(m_0 + v_0)a_0 r^{\rho_a}$ 与 $(\rho_b + A_{-1})b_0 r^{\rho_b-1}$ 相等, 可得到 b_0 , 并写成如下形式:

$$\begin{pmatrix} a_0 \\ b_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ -\frac{m_0 + v_0}{\rho_b + A_{-1}} \end{pmatrix}. \quad (15)$$

对方程 (8) 进行指标变换, 与方程 (12) 和 (13) 的推导过程类似, 得到递推关系:

$$\begin{aligned}
 \begin{pmatrix} a_{n+1} \\ b_{n+1} \end{pmatrix} = & \begin{pmatrix} (\rho + n + 1 - A_{-1}) & 0 \\ m_0 + v_0 & (\rho + 1 + n + 1 + A_{-1}) \end{pmatrix}^{-1} \left[\sum_{i=0}^{\min(I_1, n)} A_i \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{n-i} \\ b_{n-i} \end{pmatrix} \right. \\
 & + \sum_{i=0}^{\min(I_2, n-1)} \begin{pmatrix} 0 & -m_i \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{n-1-i} \\ b_{n-1-i} \end{pmatrix} + \sum_{i=1}^{\min(I_2, n+1)} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ -m_i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{n+1-i} \\ b_{n+1-i} \end{pmatrix} \\
 & \left. + \sum_{i=0}^{\min(I_3, n-1)} \begin{pmatrix} 0 & v_i \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{n-1-i} \\ b_{n-1-i} \end{pmatrix} + \sum_{i=1}^{\min(I_3, n+1)} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ -v_i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{n+1-i} \\ b_{n+1-i} \end{pmatrix} \right]. \quad (16)
 \end{aligned}$$

2) 当 $A_{-1} < 0$ 时, $\rho_b = -A_{-1} = \rho$, $\rho_a = \rho_b + 1$. 如果令 $b_0 = 1$, 由 $-(m_0 - v_0)b_0 r^{\rho_b}$ 和 $(\rho_a - A_{-1})a_0 r^{\rho_a - 1}$ 相等, 可得到 a_0 , 并写成如下形式:

$$\begin{pmatrix} a_0 \\ b_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{m_0 - v_0}{\rho_b - A_{-1}} \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (17)$$

对方程 (8) 进行指标变换, 与方程 (12) 和 (13) 的推导过程类似, 得到递推关系:

$$\begin{aligned}
 \begin{pmatrix} a_{n+1} \\ b_{n+1} \end{pmatrix} = & \begin{pmatrix} (\rho + 1 + n + 1 - A_{-1}) & (m_0 - v_0) \\ 0 & (\rho + n + 1 + A_{-1}) \end{pmatrix}^{-1} \left[\sum_{i=0}^{\min(I_1, n)} A_i \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{n-i} \\ b_{n-i} \end{pmatrix} \right. \\
 & + \sum_{i=1}^{\min(I_2, n+1)} \begin{pmatrix} 0 & -m_i \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{n+1-i} \\ b_{n+1-i} \end{pmatrix} + \sum_{i=0}^{\min(I_2, n-1)} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ -m_i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{n-1-i} \\ b_{n-1-i} \end{pmatrix} \\
 & \left. + \sum_{i=1}^{\min(I_3, n+1)} v_i \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{n+1-i} \\ b_{n+1-i} \end{pmatrix} + \sum_{i=0}^{\min(I_3, n-1)} v_i \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{n-1-i} \\ b_{n-1-i} \end{pmatrix} \right]. \quad (18)
 \end{aligned}$$

即得到了正则区波函数的级数形式, 但 (6) 式前面的待定常数 H 还需要通过波函数的连接条件确定. 接下来推导泰勒区 $[r_0, r_\infty]$ 波函数的级数形式.

2.4 泰勒区间 $[r_0, r_\infty]$ 的级数形式

为了级数在泰勒区 $[r_0, r_\infty]$ 能够快速收敛, 把该区间等分为 N 个小区间 $[r_{i-1}, r_i]$ ($i = 1, 2, \dots, N$). 在第 i 个区间的中心 $x = (r_{i-1} + r_i)/2$ 将径向波函数展开为泰勒级数:

$$\begin{pmatrix} R_A(r) \\ R_B(r) \end{pmatrix} = B \sum_{n=0}^{\infty} (r - x)^n \begin{pmatrix} b_n \\ b_n^* \end{pmatrix} + D \sum_{n=0}^{\infty} (r - x)^n \begin{pmatrix} d_n \\ d_n^* \end{pmatrix}. \quad (19)$$

由于 Dirac 方程在本质上是二阶微分方程, 其在常点邻域内应该有两个线性无关解^[20], 将该区间的级数解写为两个线性无关的级数解, 如 (19) 式等号右边所示. 两解满足同样的递推关系, 其线性无关体现在前两项的系数不同, 所以只需将 (19) 式等号右边的第一解代入方程 (4) 进行推导, 可得到:

$$\begin{cases} \left[\frac{d}{dr} + \sum_{i=1}^{I_1} A_i r^i \right] \sum_{n=0}^{\infty} b_n^* (r - x)^n = \left(-\sum_{i=0}^{I_2} m_i r^i - v_{-1} r^{-1} - \sum_{i=0}^{I_3} v_i r^i \right) \sum_{n=0}^{\infty} b_n (r - x)^n, \\ \left[\frac{d}{dr} - \sum_{i=1}^{I_1} A_i r^i \right] \sum_{n=0}^{\infty} b_n (r - x)^n = - \left(\sum_{i=0}^{I_2} m_i r^i - v_{-1} r^{-1} - \sum_{i=0}^{I_3} v_i r^i \right) \sum_{n=0}^{\infty} b_n^* (r - x)^n, \end{cases} \quad (20)$$

将方程 (20) 等号两端同时乘以 r , 并把关于 r 的幂次展开为关于 $r - x$ 的幂次, 得到:

$$\left\{ \begin{aligned} & \left[\sum_{n=0}^{\infty} nb_n^*(r-x)^n + \sum_{n=0}^{\infty} nb_n^*x(r-x)^{n-1} + \sum_{i=-1}^{I_1} A_i \sum_{k=0}^{i+1} C_{i+1}^k x^{i+1-k} (r-x)^k \sum_{n=0}^{\infty} b_n^*(r-x)^n \right] \\ &= \left[- \sum_{i=0}^{I_2} m_i \sum_{k=0}^{i+1} C_{i+1}^k x^{i+1-k} (r-x)^k - \sum_{i=-1}^{I_3} v_i \sum_{k=0}^{i+1} C_{i+1}^k x^{i+1-k} (r-x)^k \right] \sum_{n=0}^{\infty} a_n (r-x)^n, \\ & \left[\sum_{n=0}^{\infty} na_n(r-x)^n + \sum_{n=0}^{\infty} na_nx(r-x)^{n-1} - \sum_{i=-1}^{I_1} A_i \sum_{k=0}^{i+1} C_{i+1}^k x^{i+1-k} (r-x)^k \sum_{n=0}^{\infty} a_n(r-x)^n \right] \\ &= - \left[\sum_{i=0}^{I_2} m_i \sum_{k=0}^{i+1} C_{i+1}^k x^{i+1-k} (r-x)^k - \sum_{i=-1}^{I_3} v_i \sum_{k=0}^{i+1} C_{i+1}^k x^{i+1-k} (r-x)^k \right] \sum_{n=0}^{\infty} b_n^*(r-x)^n. \end{aligned} \right. \quad (21)$$

其中 $C_i^k = i!/k!/(i-k)!$ 是二项式系数. 将方程 (21) 中的指标进行变换 (例如, 方程 (21) 中第 1 个等式等号左端第 3 项会出现 $(r-x)^{n+k}$, 为了将 $(r-x)^{n+k}$ 变为与方程其他项相同的幂形式, 令 $n' = n+k$ 并变化求和符号顺序, 将 n' 指标的求和符号放在最前面, 其取值范围为 $0-\infty$, 其次是 k 指标的求和符号, 它的取值范围为 $0-\min(n, I_1+1)$, 最后是 i 指标的求和符号, 其取值范围是从 $\max(k-1, -1)$ 到 I_1 , 并把 b_n^* 中变为 $b_{n'-k}^*$, 最后再把 n' 用 n 取代), 可得到:

$$\left\{ \begin{aligned} & \sum_{n=0}^{\infty} nb_n^*(r-x)^n + \sum_{n=0}^{\infty} nb_n^*x(r-x)^{n-1} + \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\min(n, I_1+1)} \sum_{i=\max(k-1, -1)}^{I_1} b_{n-k}^* A_i C_{i+1}^k x^{i+1-k} (r-x)^n \\ &= - \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\min(n, I_2+1)} \sum_{i=\max(k-1, 0)}^{I_2} m_i C_{i+1}^k x^{i+1-k} b_{n-k} (r-x)^n - \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\min(n, I_3+1)} \sum_{i=\max(k-1, -1)}^{I_3} v_i C_{i+1}^k x^{i+1-k} b_{n-k} (r-x)^n, \\ & \sum_{n=0}^{\infty} nb_n(r-x)^n + \sum_{n=0}^{\infty} nb_nx(r-x)^{n-1} - \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\min(n, I_1+1)} \sum_{i=\max(k-1, -1)}^{I_1} b_{n-k} A_i C_{i+1}^k x^{i+1-k} (r-x)^n \\ &= - \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\min(n, I_2+1)} \sum_{i=\max(k-1, 0)}^{I_2} m_i C_{i+1}^k x^{i+1-k} b_{n-k}^* (r-x)^n + \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\min(n, I_3+1)} \sum_{i=\max(k-1, -1)}^{I_3} v_i C_{i+1}^k x^{i+1-k} b_{n-k}^* (r-x)^n. \end{aligned} \right. \quad (22)$$

令方程 (22) 等号两端 $(r-x)^n$ 前面的系数相等, 得到系数之间的递推关系:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} b_{n+1} \\ b_{n+1}^* \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} (n+1)x & 0 \\ 0 & (n+1)x \end{pmatrix}^{-1} \left[\begin{pmatrix} -n & 0 \\ 0 & -n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_n \\ b_n^* \end{pmatrix} \right. \\ &+ \sum_{k=0}^{\min(n, I_1+1)} \sum_{i=\max(k-1, -1)}^{I_1} A_i C_{i+1}^k x^{i+1-k} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_{n-k} \\ b_{n-k}^* \end{pmatrix} \\ &- \sum_{k=0}^{\min(n, I_2+1)} \sum_{i=\max(k-1, 0)}^{I_2} m_i C_{i+1}^k x^{i+1-k} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_{n-k} \\ b_{n-k}^* \end{pmatrix} \\ &\left. + \sum_{k=0}^{\min(n, I_3+1)} \sum_{i=\max(k-1, -1)}^{I_3} v_i C_{i+1}^k x^{i+1-k} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_{n-k} \\ b_{n-k}^* \end{pmatrix} \right]. \quad (23) \end{aligned}$$

根据 (22) 式中 $(r-x)^0$ 前面的系数相等, 得到如下关系:

$$\begin{pmatrix} b_0^* \\ b_1^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{i=-1}^{I_1} A_i x^{i+1} & x \\ - \left[\sum_{i=0}^{I_2} m_i x^{i+1} - \sum_{i=-1}^{I_3} v_i x^{i+1} \right] & 0 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \left[- \sum_{i=0}^{I_2} m_i x^{i+1} - \sum_{i=-1}^{I_3} v_i x^{i+1} \right] & 0 \\ - \sum_{i=-1}^{I_1} A_i x^{i+1} & x \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \end{pmatrix}, \quad (24)$$

(23) 式和 (24) 式的递推关系也适用于 (19) 式第 2 解的系数 $[d_n, d_n^*]$. 为了保证两解线性无关, 需要使它们的前两项系数不同, 令 $b_0 = 1$, $b_1 = 0$ 以及 $d_0 = 0$, $d_1 = 1$.

2.5 非正则区间 $[r_\infty, \infty]$ 的级数形式

在非正则区间 $[r_\infty, \infty]$, 束缚态的波函数呈现出指数衰减形式. 由于方程 (4) 中上下分量的衰减指数可能不同, 我们无法将上下分量同时进行级数展开. 非正则区间 $[r_\infty, \infty]$ 不会出现因去耦合而产生的附加奇点, 可对去耦合的方程 (5a) 和 (5b) 分别进行级数展开, 如同求解薛定谔方程^[15]. 方程 (5a) 和 (5b) 统一为

$$\left[\sum_{i=-1}^{K_1} w_i r^i \frac{d^2}{dr^2} + \sum_{i=-2}^{K_2} P_i r^i \frac{d}{dr} + \sum_{i=-3}^{K_3} Q_i r^i \right] R = 0. \quad (25)$$

能量 E 包含在方程 (5) 中电势 V 的 0 次项级数中, 所以 K_1 和 K_3 的最小值是 0. 根据方程 (5c) 和 (5d) 确定 $K_2 = K_1 - 1$. 将方程 (25) 解的表达式写为 e 指数形式:

$$R = G(r)e^{U(r)}. \quad (26)$$

$U(r)$ 以幂级数形式出现. 将 (26) 式代入 (25) 式中, 得到关于 $G(r)$ 的方程及其各项:

$$\left[\sum_{i=-1}^{K_1} w_i r^i \frac{d^2}{dr^2} + P^*(r) \frac{d}{dr} + Q^*(r) \right] G = 0, \quad (27)$$

$$\begin{cases} U(r) = \sum_{i=1}^K u_i r^i, & P^* = \left(\sum_{i=-1}^{K_1} 2w_i r^i \right) U' + \sum_{i=-2}^{K_2} P_i r^i, \\ Q^* = \left(\sum_{i=-1}^{K_1} w_i r^i \right) (U'' + U'^2) + \left(\sum_{i=-2}^{K_2} P_i r^i \right) U' + \sum_{i=-3}^{K_3} Q_i r^i. \end{cases} \quad (28)$$

下面要找出 $U(r)$ 中的 K 和各项系数. 为了保证 (27) 式有常规解, (27) 式中 $P^*(r)$ 的幂次须高于 $Q^*(r)$ 的幂次^[20]. 将 $U(r)$ 代入 $P^*(r)$ 和 $Q^*(r)$, 利用 $K_2 = K_1 - 1$, 得到:

$$P^*(r) = \sum_{k=-1}^{K_1} \sum_{i=1}^K 2iw_k u_i r^{i+k-1} + \sum_{i=-2}^{K_2} P_i r^i = \sum_{k=-1}^{K_1+K-1} \sum_{i=\max(1, k+1-K_1)}^{\min(K, k+2)} 2iw_{k+1-i} u_i r^k + \sum_{i=-2}^{K_2} P_i r^i = \sum_{i=-2}^{K_1+K-1} p_i^* r^i, \quad (29)$$

$$\begin{aligned} Q^*(r) &= \sum_{k=-1}^{K_1+K-2} \sum_{i=\max(2, k+2-K_1)}^{\min(K, k+3)} i(i-1)w_{k+2-i} u_i r^k + \sum_{k=-2}^{K_1+K-2} \sum_{i=\max(1, k+1-K_2)}^{\min(K, k+3)} i u_i P_{k+1-i} r^k \\ &+ \sum_{k=-1}^{K_1+2K-2} \sum_{k_1=\max(0, k-K_1)}^{\min(2K-2, k+1)} \sum_{i=\max(1, k_1+2-K)}^{\min(K, k_1+1)} i(k_1+2-i)u_i u_{k_1+2-i} w_{k-k_1} r^k + \sum_{i=-3}^{K_3} Q_i r^i. \end{aligned} \quad (30)$$

为使 $P^*(r)$ 的最高幂次高于 $Q^*(r)$ 的最高幂次, $Q^*(r)$ 中幂次高于 $K_1 + K - 2$ 的级数项必须为 0, 将 $Q^*(r)$ 写为幂次低于 $K_1 + K - 1$ 的项与幂次高于 $K_1 + K - 2$ 的项之和:

$$Q^*(r) = \sum_{i=-3}^{K_1+K-2} q_i^* r^i + T, \quad (31)$$

其中

$$T = \sum_{k=K_1+K-1}^{K_1+2K-2} \sum_{k_1=\max(0, k-K_1)}^{\min(2K-2, k+1)} \sum_{i=\max(1, k_1+2-K)}^{\min(K, k_1+1)} i(k_1+2-i)u_i u_{k_1+2-i} w_{k-k_1} r^k + \sum_{i=K_1+K-1}^{K_3} Q_i r^i. \quad (32)$$

$Q^*(r)$ 的幂次必须低于 $K_1 + K - 1$, 所以 T 的各项必须均为 0. 这就要求 T 中的 $K_3 = K_1 + 2K - 2$, 即 $K = (K_3 - K_1 + 2)/2$ 以及下式:

$$\sum_{k_1=\max(0, k-K_1)}^{\min(2K-2, k+1)} \sum_{i=\max(1, k_1+2-K)}^{\min(K, k_1+1)} i(k_1+2-i)u_i u_{k_1+2-i} w_{k-k_1} + Q_k = 0, \quad (33)$$

其中, $K_1 + K - 1 \leq k \leq K_1 + 2K - 2$. 将 $k = K_3 = K_1 + 2K - 2$ 代入 (33) 式, 得到 $U(r)$ 最高次幂的系数:

$$u_K = -\sqrt{-Q_{K_3}/w_{K_1}}/|K|, \quad (34)$$

其中, $K = (K_3 - K_1 + 2)/2$.

如果 $K > 1$, 从 (33) 式可以从高阶到低阶依次得到 $U(r)$ 中 $K > k \geq 1$ 阶级数前面的系数:

$$u_k = \frac{\left[Q_{k+K_1+K-2} + \sum_{k_1=k+K-2}^{\min(2K-2, k+K_1+K-1)} \sum_{i=k_1+2-K}^K (1-\delta_{i,k})(1-\delta_{i,k_1+2-k})i(k_1+2-i)u_i u_{k_1+2-i} w_{k+K_1+K-2-k_1} \right]}{-2kK u_K w_{K_1}}, \quad (35)$$

δ 是 Kronecker delta 符号. 将 $U(r)$ 代入 (29) 式和 (30) 式得 $P^*(r)$ 和 $Q^*(r)$, 代入 (27) 式得

$$\left[\sum_{i=-1}^{K_1} w_i r^i \frac{d^2}{dr^2} + \sum_{i=-2}^{K_1+K-1} p_i^* r^i \frac{d}{dr} + \sum_{i=-3}^{K_1+K-2} q_i^* r^i \right] G = 0. \quad (36)$$

根据方程 (36) 将 G 进一步展开为洛朗级数形式^[20]:

$$G = C r^m \sum_{n=0}^{\infty} c_n r^{-n}. \quad (37)$$

其中, C 是待定常数, m 是指标, $c_0 = 1$. 将 (37) 式代入 (36) 式中, 得到:

$$\sum_{i=-2}^{K_1-1} \sum_{n=0}^{\infty} w_{i+1} c_n (m-n)(m-n-1) r^{i-n-1} + \sum_{i=-2}^{K_1+K-1} \sum_{n=0}^{\infty} p_i^* c_n (m-n) r^{i-n-1} + \sum_{i=-2}^{K_1+K-1} \sum_{n=0}^{\infty} q_{i-1}^* c_n r^{i-n-1} = 0. \quad (38)$$

对 (38) 式的指标进行变换后得到:

$$\begin{aligned} & \sum_{n=-(K_1-2)}^{\infty} \sum_{i=\max(-2, -n+1)}^{K_1-1} w_{i+1} c_{i-1+n} (m-n+1-i)(m-n-i) r^{-n} \\ & + \sum_{n=-(K_1+K-2)}^{\infty} \sum_{i=\max(-2, -n+1)}^{K_1+K-1} p_i^* c_{i-1+n} (m-n+1-i) r^{-n} \\ & + \sum_{n=-(K_1+K-2)}^{\infty} \sum_{i=\max(-2, -n+1)}^{K_1+K-1} q_{i-1}^* c_{i-1+n} r^{-n} = 0 \end{aligned} \quad (39)$$

(39) 式中 r^{-n} 的系数都为 0. (39) 式的最高幂次是 $K_1 + K - 2$, 其系数为零确定指标 m 为

$$p_{K_1+K-1}^* m + q_{K_1+K-2}^* = 0 \Rightarrow m = -q_{K_1+K-2}^* / p_{K_1+K-1}^*. \quad (40)$$

根据 r^{-n} 的系数都为 0, 可得到递推关系式:

$$\begin{aligned} c_{K_1+K-2+n} = & - \left[\sum_{i=\max(-2, -n+1)}^{K_1-1} w_{i+1} c_{i-1+n} (m-n+1-i)(m-n-i) \right. \\ & + \sum_{i=\max(-2, -n+1)}^{K_1+K-2} p_i^* c_{i-1+n} (m-n+1-i) + \sum_{i=\max(-2, -n+1)}^{K_1+K-2} q_{i-1}^* c_{i-1+n} \left. \right] \\ & \times [p_{K_1+K-1}^* (m-n-K_1-K+2) + q_{K_1+K-2}^*]^{-1}, \end{aligned} \quad (41)$$

式中, c 的下标 $K_1 + K - 2 + n = 1, 2, 3, \dots$, 相应的 $n = -(K_1 + K - 2) + 1, -(K_1 + K - 2) + 2, -(K_1 + K - 2) + 3, \dots$. 方程 (37) 中的待定常数 C 则需要根据非正则区与最邻近的泰勒区的连接条件确定. 下面推导各个区间的连接条件.

2.6 泰勒区间的分区和连接条件

在泰勒区 $[r_0, r_\infty]$ 第 i 个小区间 $[r_{i-1}, r_i]$, 令 $\Delta i = (r_i - r_{i-1})/2$, 其右边界和左边界为

$$\begin{cases} \begin{pmatrix} R_A \\ R_B \end{pmatrix}_{i,r} = \begin{pmatrix} S_1(i) & S_3(i) \\ S_2(i) & S_4(i) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B_i \\ D_i \end{pmatrix}, \\ \begin{pmatrix} R_A \\ R_B \end{pmatrix}_{i,l} = \begin{pmatrix} S_5(i) & S_7(i) \\ S_6(i) & S_8(i) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B_i \\ D_i \end{pmatrix}, \end{cases} \quad (42)$$

其中:

$$\begin{cases} S_1(i) = \sum_{n=0}^{\infty} b_{i,n} \Delta_i^n, & S_3(i) = \sum_{n=0}^{\infty} d_{i,n} \Delta_i^n, \\ S_2(i) = \sum_{n=0}^{\infty} b_{i,n}^* \Delta_i^n, & S_4(i) = \sum_{n=0}^{\infty} d_{i,n}^* \Delta_i^n, \\ S_5(i) = \sum_{n=0}^{\infty} b_{i,n} (-\Delta_i)^n, & S_7(i) = \sum_{n=0}^{\infty} d_{i,n} (-\Delta_i)^n, \\ S_6(i) = \sum_{n=0}^{\infty} b_{i,n}^* (-\Delta_i)^n, & S_8(i) = \sum_{n=0}^{\infty} d_{i,n}^* (-\Delta_i)^n. \end{cases} \quad (43)$$

根据波函数 R 的上下分量在第 $i-1$ 区的右端与第 i 区的左端的连续性条件:

$$\begin{pmatrix} R_A \\ R_B \end{pmatrix}_{i-1,r} = \begin{pmatrix} R_A \\ R_B \end{pmatrix}_{i,l}, \quad (44)$$

可得到第 $i-1$ 区与第 i 区的常数 B 和 D 之间的关系:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} B_i \\ D_i \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} S_5(i) & S_7(i) \\ S_6(i) & S_8(i) \end{pmatrix}^{-1} \\ &\times \begin{pmatrix} S_1(i-1) & S_3(i-1) \\ S_2(i-1) & S_4(i-1) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B_{i-1} \\ D_{i-1} \end{pmatrix} \\ &= T_{i-1,i} \begin{pmatrix} B_{i-1} \\ D_{i-1} \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (45)$$

其中 $T_{i-1,i}$ 是连接第 $i-1$ 区与 i 区的常数 $[B, D]$ 的传输矩阵. 第 N 区与第 1 区常数的关系:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} B_N \\ D_N \end{pmatrix} &= T_{N-1,N} T_{N-2,N-1} \cdots T_{1,2} \begin{pmatrix} B_1 \\ D_1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B_1 \\ D_1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (46)$$

为了连接正则区 $[0, r_0]$ 和泰勒区的第 1 区 $[r_0, r_1]$, 定义波函数的上下分量在 $r = r_0$ 的比例为

K_0 . 为了连接非正则区 $[r_\infty, \infty]$ 和泰勒区的第 N 个区间 $[r_{N-1}, r_N]$ (其中 $r_N = r_\infty$), 定义波函数的上下分量在 $r = r_\infty$ 的比例为 K_∞ . K_0 和 K_∞ 的定义是:

$$\begin{pmatrix} R_A \\ R_B \end{pmatrix}_{r=r_0} = K_0, \begin{pmatrix} R_A \\ R_B \end{pmatrix}_{r=r_\infty} = K_\infty. \quad (47)$$

将 (42) 式泰勒区第 1 区的左边与第 N 区的右边的上下分量代入 (47) 式, 得到:

$$\begin{aligned} \frac{S_5(1)B_1 + S_7(1)D_1}{S_6(1)B_1 + S_8(1)D_1} &= K_0, \\ \frac{S_1(N)B_N + S_3(N)D_N}{S_2(N)B_N + S_4(N)D_N} &= K_\infty. \end{aligned} \quad (48)$$

根据 (46) 式的关系求出 $[B_N, D_N]$ 的表达式并代入 (48) 式中, 得线性方程组:

$$\begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B_1 \\ D_1 \end{pmatrix} = 0, \quad (49)$$

其中:

$$\begin{cases} M_{11} = S_5(1) - K_0 S_6(1), \\ M_{12} = S_7(1) - K_0 S_8(1), \\ M_{21} = S_1(N)T_{11} + S_3(N)T_{21} \\ \quad - K_\infty [S_2(N)T_{11} + S_4(N)T_{21}], \\ M_{22} = S_1(N)T_{12} + S_3(N)T_{22} \\ \quad - K_\infty [S_2(N)T_{12} + S_4(N)T_{22}]. \end{cases} \quad (50)$$

方程 (50) 有非平庸解, 则其前面的矩阵 $\mathbf{M}$ 的行列式值为 0. 由于 $\mathbf{M}$ 的元素中含有待定本征能量 E , 它的行列式值 $\det(\mathbf{M})$ 包含 E , 由此得到关于能量 E 的方程:

$$\det(\mathbf{M}) = M_{11}M_{22} - M_{12}M_{21} = 0. \quad (51)$$

对于束缚态, 通过数值方法求解方程 (51) 可以获得一系列的本征能量 E . 将 E 代入各个区间波函数的表达式, 归一化之后, 就获得了对应的径向波函数.

3 结果和讨论

3.1 Dirac 电子束缚态的判别准则

当电子处于束缚态时, 当 $r \rightarrow \infty$ 时波函数应该衰减为 0. 这意味着在非正则区间 $[r_\infty, \infty]$ 方程 (28) 中的 $e^{U(r)}$ 必须是衰减的, 因此 $U(r)$ 级数中展开的最

高次幂项的系数必须是负实数. 根据 (34) 式, $U(r)$ 级数展开的最高次幂前面的系数是 u_K . 根据方程 (3) 和 (5), 我们进一步得到 u_K 的表达式

$$u_K = -\frac{1}{|K|} \sqrt{A_{I_1}^2 \delta_{I_1, I} + M_{I_2}^2 \delta_{I_2, I} - V_{I_3}^2 \delta_{I_3, I}}, \quad (52)$$

其中, $I = \max(I_1, I_2, I_3)$. 当 u_K 是负实数时, 波函数在 $r \rightarrow \infty$ 时衰减至零, 此时形成的是束缚态. 当 u_K 是虚数时, 波函数在 $r \rightarrow \infty$ 时振荡, 此时形成的是扩展态. (52) 式成为 Dirac 电子形成束缚态的判据. 根据 (52) 式, 磁场 A 和质量场 M 有助于 u_K 形成负实数, 有助于 Dirac 电子束缚态的形成, 而电场 V 有助于 u_K 形成虚数从而产生 Klein 效应. 具体而言, 如果 A 或 M 的最高幂次大于 V 的最高幂次 ($I_1 > I_3$ 或 $I_2 > I_3$), 此时 u_K 没有电势项, 为负实数, Dirac 电子存在束缚态且数目不受限制, 如石墨烯中均匀磁场和库仑电势下的情况^[2,11]; 反之, 如果 V 的最高幂次大于 A 和 M 的最高幂次 ($I_1 < I_3$ 且 $I_2 < I_3$), 则 Dirac 电子会由于 Klein 效应而隧穿. 文献^[21]通过将 Dirac 方程去耦合变换为 (5a) 式和 (5b) 式的形式, 分析了磁矢势与电势为幂指数的情形, 指出 A 的幂次大于 V 的幂次时才能存在束缚态, 属于判据 (52) 式的范畴. 如果 A 或 M 的最高幂次等于 V 的最高幂次 ($I_1 = I_3$ 或 $I_2 = I_3$), 此时需要比较它们最高次幂前面系数的大小才能确定 Dirac 电子束缚态的存在情况^[14]. 总之, (52) 式 Dirac 电子束缚态-非束缚态的判据适用于各种电场、磁场和质量场下的情形且给出了束缚态指数衰减的具体形式, 为调控 Dirac 电子量子状态提供了依据.

3.2 有质量 Dirac 电子 (相对论二维类氢原子) 在库仑电势下的能级和波函数

带电杂质会影响二维材料的输运性质和光谱性质, 其常见的电势是库仑电势. 此外, 研究二维材料中电子与电子之间的相互作用也需要考虑库仑电势, 因此 Dirac 电子在库仑电势下的量子态对于理解杂质态及电子相互作用具有重要意义^[22]. 在库仑电势 $V_e = \alpha/r$ ($\alpha = Ze^2/(4\pi\epsilon\epsilon_0/\hbar v_F)$ 是精细结构常数) 下, 对于无质量的 Dirac 电子, 由于 A 和 M 均为 0, u_K 为虚数, 此时不存在束缚态^[22]. 对于有质量的 Dirac 电子, M 为常数, 能量 E 包含在电势的 0 阶幂次中. 根据方程 (3c) 和 (52) 式, $u_K = -(M^2 - E^2)^{0.5}$, 此时存在束缚态且能量 $E < M$. 相对论二维类氢原子的束缚态能级为^[23]

$$E_{n,j} = \begin{cases} M \frac{n + \sqrt{j^2 - \alpha^2}}{\sqrt{(n + \sqrt{j^2 - \alpha^2})^2 + \alpha^2}}, & j > 0, \\ M \frac{n + 1 + \sqrt{j^2 - \alpha^2}}{\sqrt{(n + 1 + \sqrt{j^2 - \alpha^2})^2 + \alpha^2}}, & j < 0, \end{cases} \quad (53)$$

其中, n 是径向量子数, j 是总角动量量子数, (n, j) 表示对应的量子态. 当库仑电势存在时, 根据方程 (10), 其正则区的指标 $\rho = \rho_a = \rho_b = (j^2 - \alpha^2)^{0.5}$ 并非整数, $V_e = \alpha/r$ 在 $r = 0$ 处无穷大, 一般数值方法无法反映 $r = 0$ 附近解的性质而不能准确拟合此区域的波函数、获得较精确的解^[11]. 本文方法在获得正则解的基础上可以无限逼近波函数, 因此能够获得精确的解. 表 1 所示为 $\alpha = -0.1$,

表 1 在库仑电势中的 $\alpha = -0.1$ 时用分区级数解法计算相对论氢原子能级的数值解与 (53) 式的解析解比较, 计算时取 $M = 500$ meV, 能级均除以 M

Table 1. Comparison between numerical energy levels by sectioned series expansion method and analytical energy levels by Eq. (53) when $\alpha = -0.1$ in the Coulomb electric potential and $M = 500$ meV, with all energy levels divided by M .

(n, j)	$E_{n,j}$ 数值解	$E_{n,j}$ 解析解	相对误差	(n, j)	$E_{n,j}$ 数值解	$E_{n,j}$ 解析解	相对误差
0, -1.5	0.9991988238614	0.99919882386158	1.8×10^{-13}	0, 0.5	0.9797958971133	0.97979589711327	2.9×10^{-14}
1, -1.5	0.9995913079808	0.99959130798090	9.9×10^{-14}	1, 0.5	0.9977551312156	0.99775512256234	8.7×10^{-9}
2, -1.5	0.9997528114902	0.99975281149021	1.4×10^{-14}	2, 0.5	0.9991944716637	0.99919446965227	2.0×10^{-9}
3, -1.5	0.9998345510564	0.99983455105648	7.9×10^{-14}	3, 0.5	0.9995897240939	0.99958972295987	1.1×10^{-9}
0, -0.5	0.9977551536827	0.99775512256234	3.1×10^{-8}	0, 1.5	0.99777530313970	0.99777530313972	1.8×10^{-14}
1, -0.5	0.9991944768698	0.99919446965227	7.2×10^{-9}	1, 1.5	0.99919882386160	0.99919882386158	2.2×10^{-14}
2, -0.5	0.9995897256360	0.99958972295987	2.7×10^{-9}	2, 1.5	0.99959130798070	0.99959130798090	2.0×10^{-13}
3, -0.5	0.9997520675873	0.99975206631993	1.3×10^{-9}	3, 1.5	0.99975281149010	0.99975281149021	1.1×10^{-13}
0, 2.5	0.9991996881893	0.99919967974374	8.5×10^{-9}	2, 2.5	0.99975295828120	0.99975295828121	9.3×10^{-15}
1, 2.5	0.9995916199728	0.99959161997285	4.7×10^{-14}	3, 2.5	0.99983463144880	0.99983463144884	4.0×10^{-14}

$M = 500 \text{ meV}$ 时 $j = -1.5, -0.5, 0.5, 1.5$ 最低 4 个能级的数值解和 (53) 式的解析解, 并比较了两者的相对误差, 相对误差低于 10^{-8} , 远低于文献 [14] 的 10^{-3} , 且随着 j 变大还会进一步降低. 图 2 所示为 $j = -0.5, 0.5$ 最低的 3 个能级的波函数, 从中看到对于 $j < 0$, 同一量子态的下分量节点数比上分量节点数多 1 个, 对于 $j > 0$, 两者的节点数相同. 此外, 下分量比上分量小, 这是因为电子质量非零, 且当电子质量达到天然的质量 512 MeV 时, 下分量基本不存在, 上分量则变为薛定谔方程的波函数. 上述结果验证了分区级数解法在求解 Dirac 方程中具有非常高的准确性.

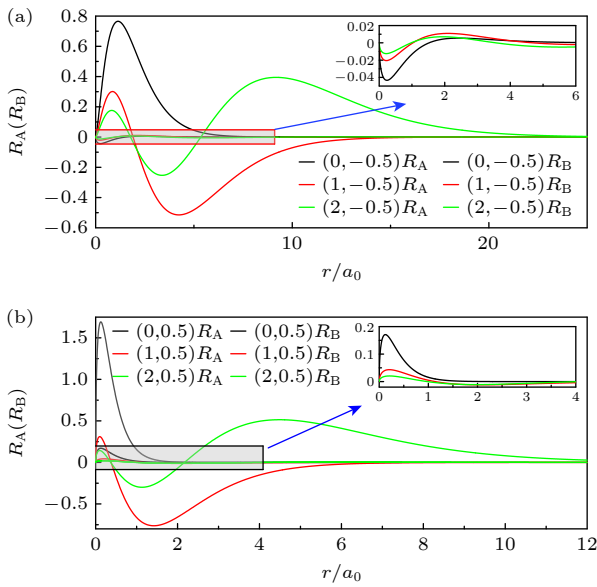


图 2 在库仑电势中的 $\alpha = -0.1$ 时用分区级数解法计算相对论氢原子能级的径向波函数上下分量 (R_A 和 R_B), 在计算时取 $M = 500 \text{ meV}$, 粗线 (细线) 分别代表上下分量, 右上方的图是对局部波函数的放大, (a), (b) 分别是 $j = -0.5$ 和 $j = 0.5$ 时最低的 3 个能级的波函数

Fig. 2. The upper and lower components (R_A 和 R_B) of the radial wave function of the relativistic hydrogen atom calculated by sectioned series expansion method when $\alpha = -0.1$ in the Coulomb electric potential and $M = 500 \text{ meV}$, bold (thin) lines represent the upper (lower) components and the insets in the top right are the zooms of parts of the functions: (a), (b) The three lowest energy levels of $j = -0.5$ and $j = 0.5$, respectively.

3.3 均匀磁场和线性电势共同作用下 Dirac 电子的能级和波函数

均匀磁场下的二维 Dirac 电子具有朗道能级, 导致二维材料出现半整数量子霍尔效应. 横向电场会破坏朗道能级, 从而会影响其输运和磁光谱性质,

因此探索 Dirac 电子在复杂电磁场下的行为有助于调控其输运和光谱性质 [24]. 线性电势 $V_e = Fr$ 是常见的电势模型 [10], 根据 (52) 式的判据, 线性电势不能形成束缚态, 这与薛定谔方程完全不同. 如果在电子运动平面上施加垂直均匀磁场 B , 其磁矢势 $A_0 = Br/2$, 由 (52) 式, $u_K = u_2 = -0.5(0.25B^2 - F^2)^{0.5}$. 当 $F < 0.5B$ 时, 存在束缚态; 当 $F > 0.5B$ 时, 存在非束缚态. Dirac 方程在 $V_e = Fr$ 和 $A_0 = Br/2$ 下不具有解析解. 如图 3 所示, 采用分区级数解法计算了磁场 $B = 10 \text{ T}$ 时 $j = -1/2, -3/2, 1/2, 3/2$ 的前几个束缚态能级随着电场强度 F 的变化. 朗道能级的粒子-空穴对称性不再存在. 当 F 趋近于 0 时, 能级趋近于朗道能级, 呈现出高度的简并性. 电势解除了朗道能级的简并, 随着 F 的增大, 能级逐渐变大. 正能级间距变大且没有发生序列改变; 负能级间距变小则产生了序列变化. 当 $F = 0.5B$ 时, 发生了有趣的现象: 如图 3 的竖直虚线所指, 正能束缚态仍然存在, 负能束缚态不能转化为正能的消失, 转化为正能的量子态仍然存在束缚态. 例如, 对 $j = -1/2$, 在 $F = 0.5B$ 时它原来的两个负能态 $(0, -1/2)$ 和 $(1, -1/2)$ 由于转变为正能而继续以束缚态存在, 其波函数如图 4(a), (b) 所示. 根据公式 (34), 在 $F = 0.5B$ 时 $u_K = u_{3/2} = -2(E_F)^{0.5}/3$, 只有能量 $E > 0$ 时 u_K

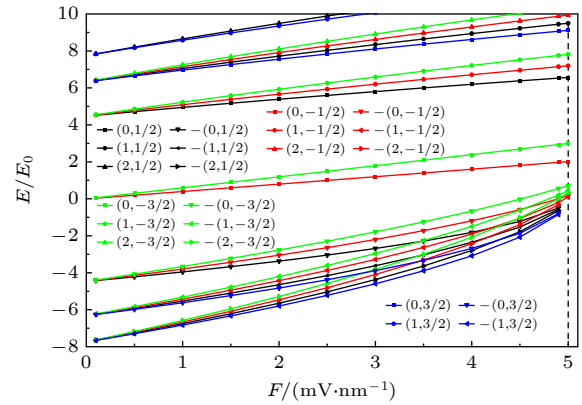


图 3 在均匀磁场 $B = 10 \text{ T}$ 时, 总角动量量子数 $j = -1/2, -3/2, 1/2, 3/2$ 的能级随着线性电势 $V = Fr$ 的变化, 其中 (n, j) 前面的负号表示负能态, $F = 5$ 时的垂直虚线是为了观察每个能级是否存在束缚态能级

Fig. 3. The energy levels of the total angular momentum quantum number $j = -1/2, -3/2, 1/2, 3/2$ as a function of the linear electric potential, the minus signs in front of (n, j) indicates the negative energy states, and the vertical dashed line at $F = 5$ is to observe whether there is a bound state for every energy level.

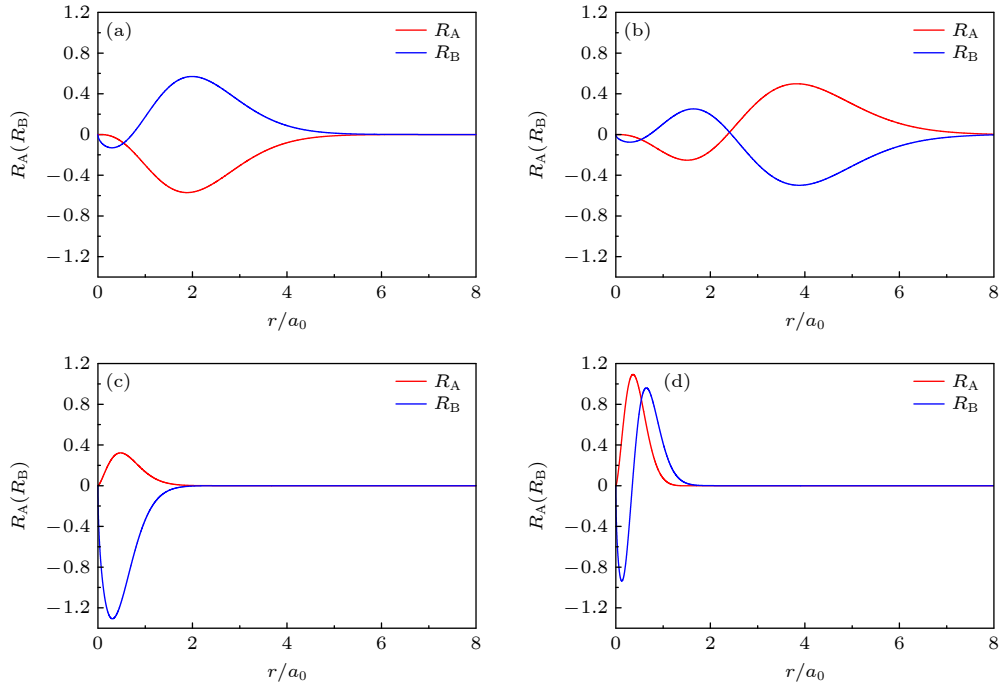


图 4 Dirac 电子在 $F = 0.5B$ 时均匀磁场和线性电势下 $j = -1/2$ 的径向波函数的上下分量 (R_A 和 R_B) (a), (b) 分别是原来负能态 $(0, -1/2)$ 和 $(1, -1/2)$ 在 $F = 0.5B$ 时转变为正能态的波函数; (c), (d) 分别是原来正能态 $(0, -1/2)$ 和 $(1, -1/2)$ 在 $F = 0.5B$ 时的波函数

Fig. 4. The upper and lower components (R_A 和 R_B) of the radial wave function of Dirac electron at $F = 0.5B$ in homogenous magnetic field and linear electric potential when $j = -1/2$: (a), (b) The original negative energy levels $(0, -1/2)$ and $(1, -1/2)$; (c), (d) the original positive energy levels $(0, -1/2)$ and $(1, -1/2)$.

为实数, 才有束缚态存在. 图 4(c), (d) 中给出了原来正能态 $(0, -1/2)$ 和 $(1, -1/2)$ 在 $F = 0.5B$ 时的波函数, 与图 4(a), (b) 比较, 其波函数更加集中于原点处, 有更强的局域性, 尽管其能量更高. 这是因为电势对于 Dirac 电子的正能态 (电子态) 和负能态 (空穴态) 具有相反的限制作用^[2]. 以上结果表明, 线性电势会改变二维 Dirac 电子的朗道能级结构, 破坏了 Dirac 电子在磁场下的电子-空穴对称性, 导致态密度发生变化, 将影响二维材料的霍尔效应和磁光谱性质^[24].

4 结 论

本文提出了求解相对论量子力学中二维 Dirac 方程的分区级数解法, 并用该方法计算了相对论氢原子的能级和波函数, 证实了该方法的准确性. 通过计算线性电势与均匀磁场组合下 Dirac 电子的能级和波函数, 该方法表现出具有求解复杂电磁场下 Dirac 方程的通用性. 在推导非正则区 Dirac 方程的解形式时, 得到了 Dirac 电子在电磁场下的束缚态的判别准则, 该准则把电场、磁场和质量场都

包含在内, 为电磁场调控 Dirac 束缚态提供了依据. 该方法为进一步研究复杂电磁场下 Dirac 电子的能级结构、光谱性质等提供了计算工具.

此外, 在计算均匀磁场和线性电势下 Dirac 电子的能级和波函数时, 研究了 Dirac 电子能级随着线性电势强度的关系, 观察到负能态能级序列变化的现象. 对于均匀磁场和线性电势, 当 $F < 0.5B$ 时, 由于磁场占主导作用束缚态存在, 反之则不存在束缚态. 在临界处 $F = 0.5B$, 原来正能的束缚态仍然存在, 而只有某些原来的负能态由于接近于零能而转化为正能态, 其束缚态继续存在, 其余负能态的束缚态则消失. 这些结论丰富了我们对于复杂电磁场下 Dirac 电子结构的认识, 为电磁场调控二维 Dirac 材料的电子结构提供了依据.

参考文献

- [1] Semenoff G W 1984 *Phys. Rev. Lett.* **53** 2449
- [2] Sun S, Zhu J L 2014 *Phys. Rev. B* **89** 155403
- [3] Novoselov K S, Geim A K, Morozov S V, Jiang D, Zhang Y, Dubonos S V, Grigorieva I V, Firsov A A 2004 *Science* **306** 666
- [4] Feng B, Ding Z, Meng S, Yao Y, He X, Cheng P, Chen L, Wu K 2012 *Nano Lett* **12** 3507

- [5] Gomes K K, Mar W, Ko W, Guinea F, Manoharan H C 2012 *Nature* **483** 306
- [6] Novoselov K S, Geim A K, Morozov S V, Jiang D, Katsnelson M I, Grigorieva I V, Dubonos S V, Firsov A V 2005 *Nature* **438** 197
- [7] Elahi M M, Vakili H, Zeng Y, Dean C R, Ghosh A W 2024 *Phys. Rev. Lett.* **132** 146302
- [8] Chen X J, Xu K, Zhang X, Liu H Y, Xiong Q H 2023 *Acta Phys. Sin.* **72** 237201 (in Chinese) [陈晓娟, 徐康, 张秀, 刘海云, 熊启华 2023 物理学报 **72** 237201]
- [9] RanY Q, Xue L H, Hu S Z 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 2435 (in Chinese) [冉扬强, 薛立徽, 胡嗣柱 2002 物理学报 **51** 2435]
- [10] Silbar R R, Goldman T 2010 *Eur. J. Phys.* **32** 217
- [11] Kandemir B S, Mogulkoc A 2010 *Eur. Phys. J. B* **74** 535
- [12] Lee C M, Lee R C H, Ruan W Y, Chou M Y 2010 *Appl. Phys. Lett.* **96** 212101
- [13] Zhang Y H, Tang L Y, Zhang X Z, Shi T Y, Mitroy J 2012 *Chin. Phys. Lett.* **29** 063101
- [14] Giavaras G, Maksym P A, Roy M 2009 *J. Phys. : Condens. Matter* **21** 102201
- [15] Zhu J L, Xiong J J, Gu B L 1990 *Phys. Rev. B* **41** 6001
- [16] Ezawa M 2012 *New J. Phys.* **14** 33003
- [17] Fishbane P M, Gasiorowicz S G, Johanssen D C, Kaus K 1983 *Phys. Rev. D* **27** 2433
- [18] Batchelor M T, Henry R A, Lu X 2023 *AAPPS Bulletin* **33** 29
- [19] Zhu J L, Sun S 2012 *Phys. Rev. B* **85** 035429
- [20] Wang Z X, Guo D R 2012 *Special Functions* (Beijing: Peking University Press) pp39–58 (in Chinese) [王竹溪, 郭敦仁 2012 特殊函数概论 (北京: 北京大学出版社) 第 39—58 页]
- [21] Giavaras G, Nori F 2010 *Appl. Phys. Lett.* **97** 243106
- [22] Pereira V M, Nilsson J, Neto A H C 2007 *Phys. Rev. Lett.* **99** 166802
- [23] Novikov D S 2007 *Phys. Rev. B* **76** 245435
- [24] Lukose V, Shankar R, Baskaran G 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 116802

Solution of two-dimensional Dirac equation by sectioned series expansion method*

SUN Songyang^{1)†} ZHU Jialin²⁾

1) (College of Physics, Changchun University of Science and Technology, Changchun 130022, China)

2) (Department of Physics, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

(Received 8 March 2025; revised manuscript received 14 May 2025)

Abstract

With the discovery of two-dimensional materials like graphene, the relativistic two-dimensional Dirac equation has received increasing attention from researchers. Accurately solving the Dirac equation in electromagnetic fields is the foundation for studying and manipulating quantum states of Dirac electrons. Sectioned series expansion method is successful and accurate in solving Schrödinger equation under complex electromagnetic fields. Dirac equation is a system of coupled first-order differential equations with undermined eigenvalues, and it is more difficult to solve. By applying the sectioned series expansion principle to Dirac equation and conducting series expansions in regular, Taylor and irregular regions, we obtain an accurate method with wide applicability. With the method, a universal criterion for bound states of Dirac electrons in electromagnetic fields is derived and the energy levels and wave functions of bound states can be accurately calculated. The criterion given in the main text body shows that the magnetic field and mass field help to confine Dirac electrons while the electric field tends to deconfine them due to Klein tunneling. When the highest power of the electric potential is equal to that of the magnetic vector potential or the mass field, confined-deconfined states depend on the comparison of their coefficients. We apply the method to two cases: one is massive Dirac electron in Coulomb electric potential (relativistic two-dimensional hydrogen-like atom) and the other is Dirac electron in uniform magnetic field (magnetic vector potential is $A = 1/2Br$) and linear electric potential $V = Fr$. The energy levels of the hydrogen-like atom are calculated and compared with analytical solutions, demonstrating the exceptional accuracy of the method. By solving Dirac equation under uniform magnetic field and linear electric potential, the method proves to be broadly applicable to the solutions of Dirac equation under complex electromagnetic fields. Under uniform magnetic field B and $V = Fr$, as the F increases, level orders of negative energy states change and at the critical point $F = 0.5B$, the bound states of positive ones still exist while only certain negative ones can exist on condition that their energies exceed zero. The sectioned series expansion method provides an effective computational framework for Dirac equation and it deepens our understanding of relativistic quantum mechanics.

Keywords: Dirac equation, sectioned series expansion method, bound states, relativistic two-dimensional hydrogen-like atom

PACS: 03.65.Ge, 02.30.Hq, 02.30.Mv, 03.65.-w

DOI: 10.7498/aps.74.20250302

CSTR: 32037.14.aps.74.20250302

* Project supported by the Scientific Research Foundation of the Education Department of Jilin Province, China (Grant No. JJKH20250474KJ) and the Scientific Research Program of the Higher Education Association of Jilin Province, China (Grant No. JGJX24B10).

† Corresponding author. E-mail: sunsongyang@cust.edu.cn

分区级数解法在二维Dirac方程中的应用

孙松阳 朱嘉麟

Solution of two-dimensional Dirac equation by sectioned series expansion method

SUN Songyang ZHU Jialin

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 74, 140301 (2025) DOI: 10.7498/aps.74.20250302

CSTR: 32037.14.aps.74.20250302

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250302>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

一种基于束缚态的可调等离子体光子晶体窄带滤波器

A tunable narrow-band plasma photonic crystal filter based on bound state

物理学报. 2021, 70(17): 175201 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210241>

二维声子晶体中Zak相位诱导的界面态

Zak phase induced interface states in two-dimensional phononic crystals

物理学报. 2022, 71(4): 044301 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211642>

二维光子晶体中的双波段半狄拉克锥与零折射率材料

Dual-band semi-Dirac cones in two-dimensional photonic crystal and zero-index material

物理学报. 2024, 73(18): 181101 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240800>

二维系统研究中的无电极输运方法

Contactless transport method of two-dimensional electron system studies

物理学报. 2022, 71(12): 127303 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220246>

电子型FeSe基高温超导体的磁通束缚态与Majorana零能模

Vortex bound states and Majorana zero mode in electron-doped FeSe-based high-temperature superconductor

物理学报. 2021, 70(1): 017401 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201673>

二维Janus原子晶体的电子性质

Electronic properties of two-dimensional Janus atomic crystal

物理学报. 2021, 70(2): 026801 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201406>