

文章编号: 1005-8893(2000)01-0040-04

## 二维和三维氢原子能级精细结构比较<sup>\*</sup>

江兴方<sup>1</sup>, 柯善哲<sup>2</sup>

(1. 江苏石油化工学院 基础课部 江苏 常州 213016; 2 南京大学 物理系, 江苏 南京 210093)

摘要: 从二维和三维氢原子能级的精细结构表达式出发, 进行数值计算, 找到能级的精细结构数值的规律性。利用多媒体著作工具 Multimedia ToolBook 计算能级并画出能级图和能级间距图, 进行比较。证实从三维降为二维能级降低而能级间距增大。从基态到第一激发态、从第一激发态到第二激发态、从第二激发态到第三激发态二维能级间距分别是三维能级间距的 4.74、2.05 和 1.61 倍。

关键词: 氢原子能级的精细结构; 能级间距; 多媒体著作工具

中图分类号: O 411.2

文献标识码: A

### 引言

当前低维凝聚态物理的发展, 维数的改变对材料性能的影响, 以及能级的计算成为重要的研究方面。研究对象的几何尺寸小于系统物质性质的特征尺寸时, 维数相应就会降低。例如  $z$  方向几何尺寸  $\Delta z$  远远小于成键力的有效力程, 或者远远小于波函数的有效范围(衰减到  $1/e$  以后不计), 维数就降低; 分子束外延技术可以做到在衬底上涂上一层厚度为几个原子的薄膜, 可以作二维处理; He 表面的电子层, 其厚度是埃的数量级, 在大于埃的区域, 波函数按指数形式衰减, 可看成二维情形。低维物理已经揭示了维度减少后, 系统有着新的物理性质。研究二维氢原子问题是研究二维原子和类氢离子的基础, 因此也是研究二维晶体不可缺少的步骤。由于狄拉克方程中包含自旋和轨道运动的相互作用, 故从中解得的束缚态能量本征值已包含能级的精细结构。在此基础上可研究晶体能带的精细结构。虽然三维和二维氢原子问题的狄拉克方程的解析解都已经得到, 但具体的能级的精细结构还需借助数值计算而给出, 这些数据是研究晶体能带的精细结构所不可缺少的。

比较二维和三维氢原子的能级精细结构, 我们同时进行了二者的能级计算并绘出能级图和能级间距图。取库仑势  $V(r) = -Z\alpha/r$  时, 求解狄拉克方程, 得到三维氢原子能级的精细结构:

$$E = \frac{\mu}{\sqrt{1 + \frac{Z^2 \alpha^2}{(\nu + n_r)^2}}} \quad (1)$$

式中采用了自然单位, 即  $\hbar = c = 1$ ,  $\alpha = e^2 = 1/137$ , 式中  $\mu$  中电子静质量,  $\nu = \sqrt{(j + 1/2)^2 - (Z\alpha)^2}$ , 其中  $j$  是半奇整数, 即为  $1/2, 3/2, 5/2, \dots$ , 同时  $n_r$  的取值为  $0, 1, 2, \dots$ 。

文献 [1] 给出了二维氢原子的能级精细结构:

$$E = \frac{\mu}{\sqrt{1 + \frac{Z^2 \alpha^2}{(\nu + n_\rho)^2}}} \quad (2)$$

式中  $\nu = \sqrt{(m + 1/2)^2 - (Z\alpha)^2}$  ( $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ ), 同时  $n_\rho$  的取值为  $0, 1, 2, \dots$ 。

### 1 能级与能级间距

我们使用多媒体著作工具 Multimedia ToolBook 对三维和二维氢原子能级精细结构进行数值计

\* 收稿日期: 2000-02-25

作者简介: 江兴方(1963-), 男, 江苏武进人, 江苏石油化工学院讲师, 主要从事多媒体物理软件开发研究。

算<sup>[2,3]</sup>, 并利用软件的友好界面, 同时作出三维、二维精细结构能级图和三维、二维能级间距图, 通过数值与图形共同进行比较。

1.1 计算  $(E-\mu)/\mu$  值

在 (1) 式中我们将  $j=0.5, 1.5, \dots$ , 代入,

表 1 三维氢原子能级的精细结构

$n_r$	$j$					
	0.5	1.5	2.5	3.5	4.5	5.5
0	-266.400 266 44	-66.599 401 27	-29.599 679 13	-16.649 808 73	-10.655 874 39	-7.399 911 57
1	-66.600 288 39	-29.599 766 75	-16.649 827 21	-10.655 880 07	-7.399 913 67	-5.436 670 17
2	-29.600 029 60	-16.649 864 17	-10.655 889 53	-7.399 917 04	-5.436 671 55	-4.162 450 73
3	-16.649 975 06	-10.655 908 46	-7.399 922 52	-5.436 673 62	-4.162 451 66	-3.288 849 99
4	-10.655 965 23	-7.399 933 47	-5.436 677 07	-4.162 453 05	-3.288 850 64	-2.663 968 48
5	-7.399 966 33	-5.436 683 96	-4.162 455 35	-3.288 851 61	-2.663 968 95	-2.201 626 81

表 2 二维氢原子能级的精细结构

$n_\rho$	$m$					
	0	1	2	3	4	5
0	-1 065.643 651 78	-118.399 242 25	-42.623 565 71	-21.746 694 50	-13.155 402 13	-8.806 506 95
1	-118.404 850 16	-42.623 807 95	-21.746 732 33	-13.155 412 02	-8.806 510 39	-6.305 251 19
2	-42.625 019 25	-21.746 820 61	-13.155 429 82	-8.806 515 81	-6.305 253 28	-4.735 944 40
3	-21.747 262 05	-13.155 471 36	-8.806 525 56	-6.305 256 56	-4.735 945 76	-3.687 153 96
4	-13.155 679 05	-8.806 548 31	-6.305 262 47	-4.735 947 90	-3.687 154 90	-2.951 765 89
5	-8.806 662 07	-6.305 276 25	-4.735 951 74	-3.687 156 37	-2.951 766 55	-2.416 298 11

从 (1) 式我们可以看到由于  $\alpha=1/137$ , 根号中第二项平方后再与前一项相比可以忽略不计, 因此, 在表 1、表 2 中斜直线格中数值基本相等, 误差小于十万分之一点三。因此在作能级图时, 仅仅只要画出 (1) 式中  $j=0.5$  时各  $n_r$  的能级位置, 其他的  $j$  值相应的能级只要将能级图坐标轴向右平移即可。(2) 式中只要画出  $m=0$  时各  $n_\rho$  的能级位置, 其他的  $m$  值相应的能级同理也只要将坐标轴向右平移。

1.2 程序设计

(1) 画出三维和二维氢原子精细结构能级图。如图 1 所示, 我们设计了两个按钮分别用来计算三维和二维氢原子能级的精细结构, 两套能级精细结构图到了第 6 级差别基本消失, 因此设计了 22 个域分别用来表示  $n_r$  和  $n_\rho$  在取值范围 (0—10) 内的  $(E-\mu)/\mu$  值。其中“二维”按钮的程序是:

```
to handle buttonclick
m=1; t=m-0.5
step j from 1 to 11
y=sqrt(t*2-(1/137)*(1/137))
```

在 (2) 式中将  $m=0, 1, 2, \dots$ , 代入后进行计算。如表 1、表 2 所示, 表格中的数值是  $(E-\mu)/\mu$  乘以  $10^8$  倍后的值。

```
A=1/(sqrt(1+(1/(137*(y+j-1))^2)))-1
B=100 000 000 *A
C=(100 000 000 *B div 10)/100 000 000
put C into text of field ("field2" &j)
end
end
```

以横坐标表示量子数  $n_r$  和  $n_\rho$ , 以纵坐标表示  $(E-\mu)/\mu$ , 由于  $(E-\mu)/\mu$  的计算值的数量级是  $10^{-5}-10^{-9}$  之间, 而且都集中在  $10^{-9}$  附近, 因此我们将  $(E-\mu)/\mu$  数值扩大  $10^8$  倍。

(2) 画出三维和二维氢原子精细结构能级间距图。如图 2 所示, 我们列出三维、二维氢原子精细结构能级间距值, 并且在同一图中显示两套能级间距图, 为了区别这两套能级间距图, 较小的三维能级间距图位于二维能级间距图的左边, 可以看出在能级较小时两套能级间距差别很大, 到了第 6 级以后差别基本消失。其中二维氢原子精细结构能级间距图程序为:

```
to handle buttonclick
step i from 1 to 9
set vertices of line ("line2" &i) to (2 790+ \
```

420 \* (i+0.7)), (6 425+405 \*(text of field \ end  
 (“field2” &i)—text of field (“field2” &(i+ \ end  
 1)))/20), (2 790+420 \*(i+0.7)), 6 425

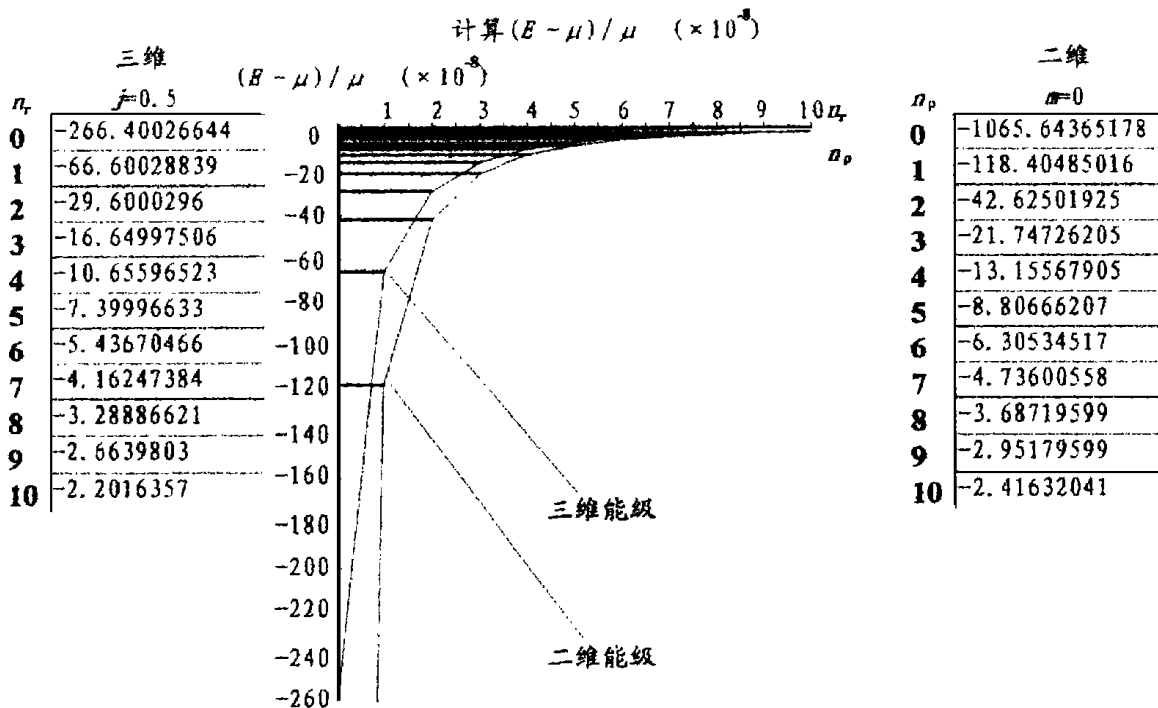


图 1 三维、二维氢原子精细结构能级图

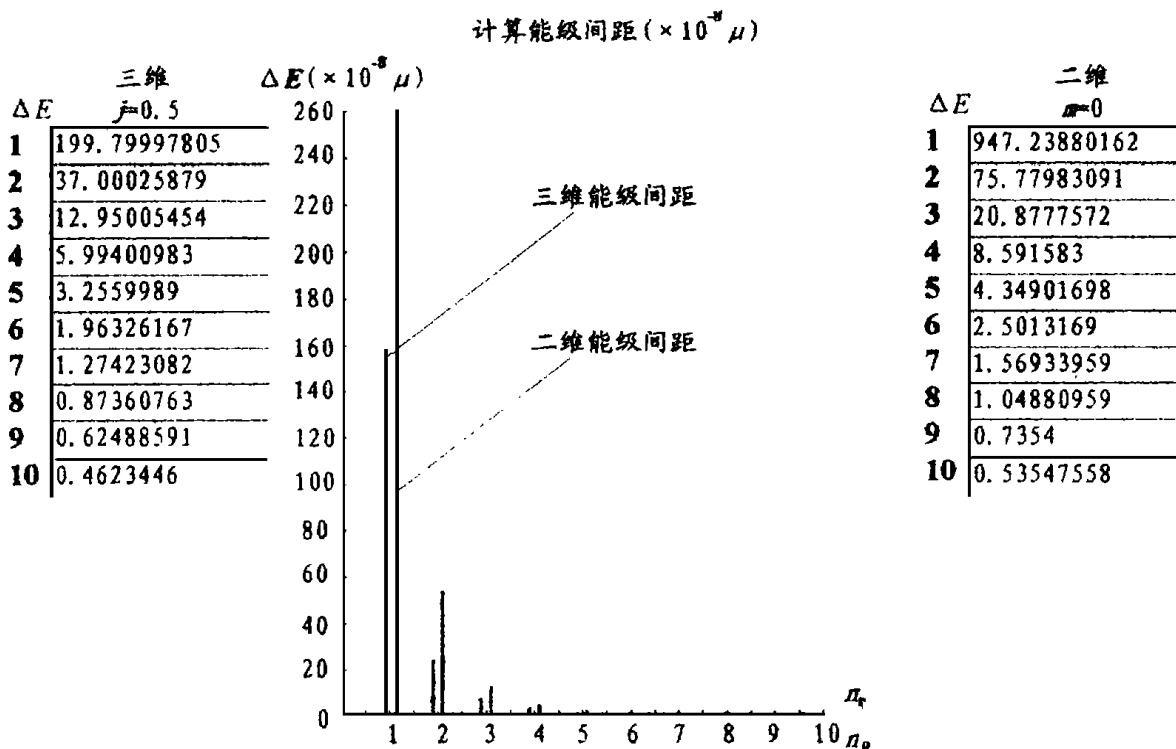


图 2 三维、二维氢原子精细结构能级间距图

## 2 讨 论

从图 1 可以清晰地看到三维氢原子精细结构能级位于二维的上方, 就是说从三维到二维能级相应下降。图 2 精确给出了三维和二维氢原子精细结构能级间距值和能级间距图, 从基态到第一激发态、从第一激发态到第二激发态、从第二激发态到第三激发态二维能级间距分别是三维能级间距的 4.74、2.05 和 1.61 倍, 与文献 [1] 进行近似计算的结果相吻合。

计算结果二维能级比三维相应的能级低, 可能和二维动能  $(p_x^2 + p_y^2) / 2\mu$  与三维动能  $(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) / 2\mu$  之间的差别有关。

二维能级间距比三维能级间距相应大, 可能与势能反比于矢径  $r$  有关, 表明低维物理有着新的物理性质, 必将被相关实验所揭示。

致谢: 在完成本论文过程中李金华研究员给予了热情指导, 沈小明同志提供了有益的建议。

## 参 考 文 献

- [1] 柯善哲. 二维氢原子能级的精细结构 [J]. 南京大学学报, 1995, 1 (31): 25—32.
- [2] 江兴方. 模拟静电场的多媒体软件制作 [J]. 江苏石油化工学院学报, 1998, 2 (38): 54—57.
- [3] 江兴方. 正确确定遏止电压 测量普朗克常数 [J]. 江苏石油化工学院学报, 1999, 1 (41): 53—55.

## Comparison of the Fine Structure of Energy Levels of a 2—D and a 3—D Hydrogen Atom

JIANG Xing—fang<sup>1</sup>, KE Shan—zhe<sup>2</sup>

(1. Department of General Courses, Jiangsu Institute of Petrochemical Technology, Changzhou 213016, China; 2. Department of Physics, Nanjing University, Nanjing 210093, China)

**Abstract:** Based on the fine structure representations of energy levels of a 2—D and a 3—D hydrogen atom, this paper has calculated the numerical values of the energy levels and drawn the figures of energy levels and the difference of energy levels of 2—D and 3—D hydrogen atom with Multimedia ToolBook. By comparing energy levels of a 2—D hydrogen atom with those of a 3—D hydrogen, it is found that the decrease in energy levels was caused by reduction of dimensionality, and spacing between energy levels increased. The spacing of energy levels of a 2—D hydrogen atom from the ground state to the first excited state, the spacing of energy levels of a 2—D hydrogen atom from the first excited state to the second excited state and the spacing of energy levels of a 2—D hydrogen atom from the second excited state to the third excited state is 4.74, 2.05 and 1.61 times as that of a 3—D hydrogen atom.

**Key words:** the fine structure of energy levels of hydrogen atom; the spacing of energy levels; Multimedia ToolBook