DOI:10.16854/j.cnki.1000-0712.2014.03.007

半无限高方势阱能级的近似公式

胡宗元

(首都经济贸易大学 安全与环境工程学院,北京 100070)

摘要: 在无量纲化的基础上,通过引入角参数的方法推出了一个新的一维半无限高方势阱的能级关系. 由此进一步得到了能级的近似公式,并进行了误差分析. 经过与数值结果的对比,本文得到的近似公式具有较高的精确度和较一般的适用性.

关键词: 半无限高方势阱; 能级; 近似公式

中图分类号: O 413.1　　文献标识码: A　　文章编号: 1000-0712(2014)03-0003-04

作为量子力学教材中计算能级的一个典型的例子,一维无限深方势阱[1]过于理想化. 实际势阱都是有限深的,不容易看出无限深方势阱能级公式的应用价值. 为此,我们具体研究了半无限高方势阱中粒子的能级,利用无量纲化方法得到了一个新的能级关系,由此导出了一个近似公式,并分析了它们与无限深方势阱能级之间的具体关系.

在本文第 1 节中,我们采用了无量纲化方法,引入了一个新的角参数,得到了一个用无量纲波数表示的能级方程; 在第 2 节中,对所得到的新能级方程进行了定性分析,并作了数值计算; 在第 3 节中,导出了半无限高方势阱能级的近似公式,并进行了误差分析; 最后是一个简明的小结.

1 一维半无限高方势阱的能级方程

不失一般性,一维半无限高方势阱[2]的势能为

$$U(x)=\begin{cases}\infty, & x<0\\ 0, & 0\leqslant x<a\\ U_0, & a\leqslant x\end{cases} \tag{1}$$

由于势场是不连续的分段函数,我们将能量本征函数 $\psi(x)$ 也表示为分段形式. 考虑到在区间 $x<0$ 内势能为无穷大,因此 $\psi(x)=0$; 在 $x\geqslant 0$ 区间内

$$\psi(x)=\begin{cases}\varphi_0(x), & 0\leqslant x<a\\ \varphi_1(x), & a\leqslant x\end{cases} \tag{2}$$

对应的定态薛定谔方程为

$$\begin{cases}-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\mathrm{d}^2\varphi_0}{\mathrm{d}x^2}=E\varphi_0, & 0\leqslant x<a\\ -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\mathrm{d}^2\varphi_1}{\mathrm{d}x^2}+U_0\varphi_1=E\varphi_1, & a\leqslant x\end{cases} \tag{3}$$

定义无量纲坐标 $\xi=x/a$,上式成为

$$\begin{cases}\dfrac{\mathrm{d}^2\varphi_0}{\mathrm{d}\xi^2}+\varepsilon\varphi_0=0, & 0\leqslant\xi<1\\ \dfrac{\mathrm{d}^2\varphi_1}{\mathrm{d}\xi^2}-(u-\varepsilon)\varphi_1=0, & 1\leqslant\xi\end{cases} \tag{4}$$

其中

$$\varepsilon=\frac{2ma^2E}{\hbar^2},\quad u=\frac{2ma^2U_0}{\hbar^2} \tag{5}$$

分别为无量纲能量和无量纲势垒高度.

在束缚态的条件下,有关系 $\varepsilon<u$. 考虑到束缚态边界条件 $\psi(\infty)=0$,$\psi(0)=0$,由式(4)容易解出

$$\psi=\begin{cases}A\sin\sqrt{\varepsilon}\xi, & 0\leqslant\xi<1\\ B\mathrm{e}^{-\sqrt{u-\varepsilon}\xi}, & 1\leqslant\xi\end{cases} \tag{6}$$

利用在 $\xi=1$ 处的连续性条件,立刻得到能级方程

$$\kappa\cot(\kappa)=-\sqrt{\beta^2-\kappa^2} \tag{7}$$

其中 $\kappa=\sqrt{\varepsilon}$,$\beta=\sqrt{u}$ 分别为与无量纲能量对应的波数和无量纲势垒高度参数.

考虑到 $0<\varepsilon<u$,即 $0<\kappa<\beta$,我们可以引入一个角参数

$$\theta=\arcsin(\kappa/\beta),\quad \theta\in\left(0,\frac{1}{2}\pi\right) \tag{8}$$

由此,式(7)简化为

$$\beta\sin\theta\cot(\kappa)=-\beta\cos\theta \tag{9}$$

容易解出

$$\kappa=\beta\sin\theta=n\pi-\theta,\quad n\in Z^+ \tag{10}$$

由此可以确定参数 $\theta_n(\beta)$,进一步求出无量纲波数和无量纲能量(以下简称波数和能量)

$$\kappa_n=\beta\sin\theta_n,\quad \varepsilon_n=\kappa_n^2,\quad n\in Z^+ \tag{11}$$

这说明我们得到的新关系式(10),其本质是决定能

收稿日期: 2013-08-28; 修回日期: 2013-09-24

基金项目: 国家自然科学基金项目(11005075)资助

作者简介: 胡宗元(1984—),男,山东日照人,首都经济贸易大学安全与环境工程学院博士研究生,研究方向: 光电子学与量子光通信.

(C)1994-2020 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

级的方程.

2 定性分析与数值结果

考虑到角参数 θ 仅仅在第一象限内取值，由能级方程(10)，我们得到与第 n 个能级对应的波数取值范围为

$$\kappa_n \in \left(n\pi - \frac{1}{2}\pi, n\pi\right), \quad n \in Z^+ \tag{12}$$

由于 $\kappa = \beta \sin\theta < \beta$，因此可得最大能级数 $n_{\max}$ 满足关系

$$\beta \in \left(n_{\max}\pi - \frac{1}{2}\pi, n_{\max}\pi\right) \tag{13}$$

故不难推出最大能级数的计算公式

$$n_{\max} = \lfloor \beta/\pi \rceil \tag{14}$$

上式中的 $\lfloor\ \rceil$ 表示四舍五入取整.

由能级方程(10)，对于给定的能级 n，当势阱高度参数 β 变化时，有

$$\frac{\mathrm{d}\kappa_n}{\mathrm{d}\beta} = \sin\theta_n + \beta\cos\theta_n \frac{\mathrm{d}\theta_n}{\mathrm{d}\beta} = -\frac{\mathrm{d}\theta_n}{\mathrm{d}\beta}$$

由上式容易解出

$$\frac{\mathrm{d}\kappa_n}{\mathrm{d}\beta} = \frac{\sin\theta_n}{1 + \beta\cos\theta_n} > 0 \tag{15}$$

这说明能级随着势垒高度的增大而增大. 这个结果与赫尔曼－费恩曼定理[3]的预言定性一致，但是后者在本文的情况下不能直接应用.

当势阱高度参数 $\beta \to \infty$ 时，有 $\theta_n \to 0$，于是得到

$$\kappa_n = \beta \sin\theta_n = n\pi - \theta_n \to n\pi \tag{16}$$

这正是一维无限深方势阱中的结果.

另一方面，能级公式(10)可以改写为

$$\begin{cases} \kappa_n = \beta \sin\theta \\ \kappa_n = n\pi - \theta \end{cases} \tag{17}$$

这样就能用作图法求出两条曲线的交点，从而得到交点的高度，即能级对应的波数. 下面给出了势阱高度参数 β 分别取 5、10、15、20、25 和 30 时，用 Mathematica 作出的对应曲线，见图 1—图 6.

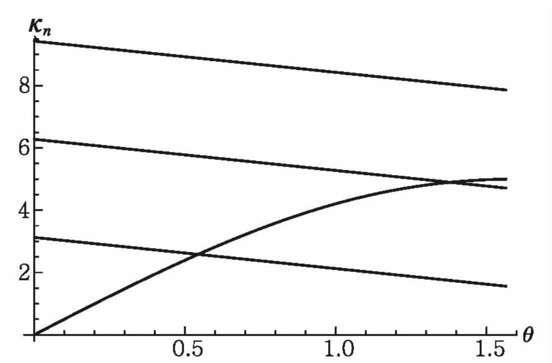

图 1 $\beta = 5$ 时的能级关系曲线

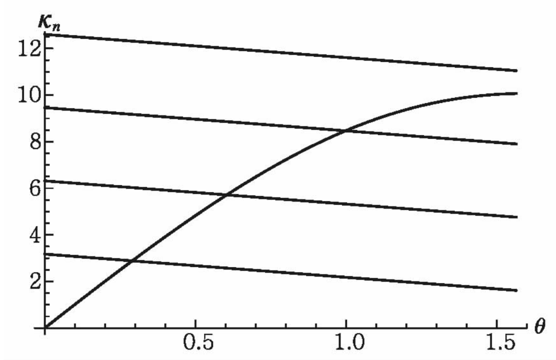

图 2 $\beta = 10$ 时的能级关系曲线

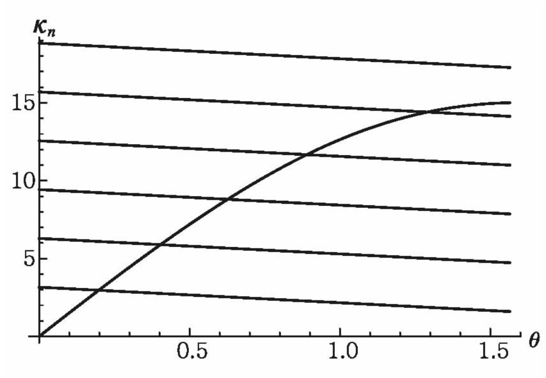

图 3 $\beta = 15$ 时的能级关系曲线

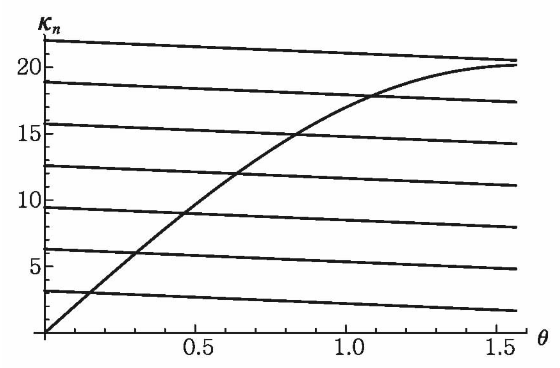

图 4 $\beta = 20$ 时的能级关系曲线

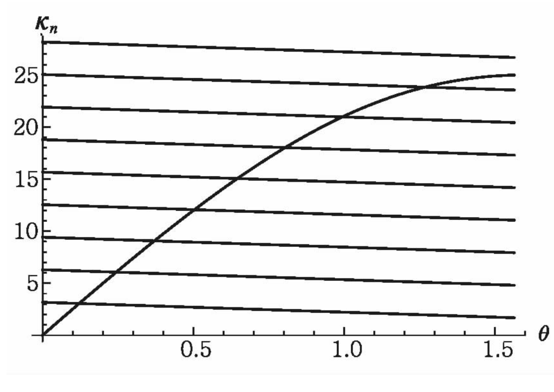

图 5 $\beta = 25$ 时的能级关系曲线

(C)1994-2020 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

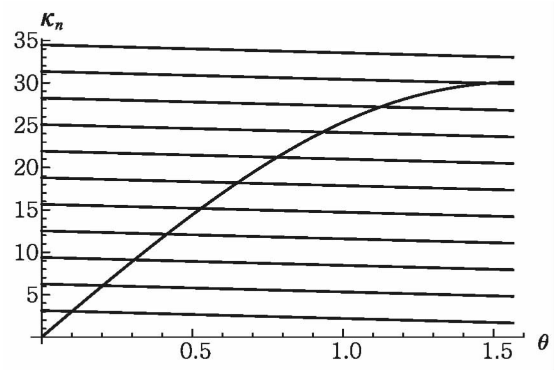

图 6　$\beta = 30$ 时的能级关系曲线

用 Mathematica 直接求解能级公式(10)，可以得到不同势垒高度、不同能级时波数 κ 的数值结果.

表 1　无量纲波数的数值结果

κ	$\beta=5$	$\beta=10$	$\beta=15$	$\beta=20$	$\beta=25$	$\beta=30$
$n=1$	2.596	2.852	2.944	2.991	3.020	3.040
$n=2$	4.906	5.679	5.880	5.980	6.039	6.079
$n=3$		8.423	8.798	8.960	9.054	9.116
$n=4$			11.67	11.93	12.06	12.15
$n=5$			14.42	14.87	15.06	15.18
$n=6$				17.76	18.04	18.20
$n=7$					20.99	21.21
$n=8$					23.86	24.19
$n=9$						27.14
$n=10$						29.92

容易看出，上述能级关系曲线和波数的数值结果与我们前面的定性分析完全相符.

3　能级的近似公式与误差分析

根据式(12)给出的取值范围，可以得到波数的一个简单近似表达式

$$\kappa_n \approx n\pi - \frac{1}{4}\pi,\quad n = 1, 2, \cdots, n_{\max} \tag{18}$$

显然其误差的绝对值 $|\Delta\kappa_n|$ 不大于 $\frac{1}{4}\pi$. 这表明在束缚态存在的条件下，无限深方势阱的波数经过简单的修正(减去 $\frac{1}{4}\pi$)后，可以作为半无限高方势阱波数 κ 的粗略近似. 该近似的相对误差为

$$|\delta\kappa_n| = \frac{|\Delta\kappa_n|}{\kappa_n} < \frac{1}{4n-1},\quad n = 1, 2, \cdots, n_{\max} \tag{19}$$

上式说明当能级数 n 较大时，简单近似式(18)具有较高的精度; 但是当能级数 n 较小时，简单近似式就会出现较大的误差，这时需要另行分析.

注意到当 $n << n_{\max}$，即 $\beta >> n\pi$ 时，$\theta \approx 0$，有近似表达式 $\sin\theta \approx \theta$，于是得到

$$\beta\sin\theta \approx n\pi - \sin\theta \Rightarrow \sin\theta \approx \frac{n\pi}{\beta+1}$$

由此得到较低能级波数的一个改进的近似表达式

$$\kappa_n = \beta\sin\theta_n \approx \frac{\beta n\pi}{\beta+1},\quad n << n_{\max} \tag{20}$$

上述近似结果与无限深方势阱的波数 $n\pi$ 成比例.

为了估计上述近似公式的误差，我们将 $\theta \approx 0$ 时的高阶泰勒展开式

$$\theta \approx \sin\theta + \frac{1}{6}\sin^3\theta$$

代入能级公式(10)后可以得到

$$\kappa_n \approx n\pi - \sin\theta_n - \frac{\sin^3\theta_n}{6} \approx \frac{\beta n\pi}{\beta+1} - \frac{(n\pi)^3}{6(\beta+1)^3} \tag{21}$$

由此推出近似波数公式(20)的误差为

$$\Delta\kappa_n \approx -\frac{(n\pi)^3}{6(\beta+1)^3} \tag{22}$$

对应的相对误差为

$$\delta\kappa_n = \frac{\Delta\kappa_n}{\kappa_n} \approx -\frac{(n\pi)^2}{6\beta(\beta+1)^2} \tag{23}$$

考虑到能量 $\varepsilon_n = \kappa_n^2$，于是得到能量的近似公式和相对误差估计分别为

$$\varepsilon_n = \kappa_n^2 = \frac{(\beta n\pi)^2}{(\beta+1)^2},\quad \delta\varepsilon_n = 2\delta\kappa_n \approx -\frac{(n\pi)^2}{3\beta(\beta+1)^2},\quad n << n_{\max} \tag{24}$$

表 2 给出了近似公式(20)及其相对误差的数值结果.

表 2　近似波数公式(20)及其相对误差的数值结果

κ	$\beta=5$		$\beta=10$		$\beta=15$		$\beta=20$	
	近似解	误差/%	近似解	误差/%	近似解	误差/%	近似解	误差/%
$n=1$	2.618	0.86	2.856	0.13	2.945	0.04	2.992	0.02
$n=2$	5.236	6.72	5.712	0.58	5.890	0.17	5.984	0.07
$n=3$			8.568	1.72	8.836	0.43	8.976	0.18
$n=4$					11.78	0.91	11.97	0.34
$n=5$					14.73	2.15	14.96	0.61
$n=6$							17.95	1.10

(C)1994-2020 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved.　http://www.cnki.net

由上面的数值结果可以看出，我们得到的近似公式(20)不仅在较低能级时比较精确，而且在较高能级时也近似成立，具有较广的适用范围.

4 结论

本文利用无量纲化方法研究了一维半无限高方势阱对应的定态薛定谔方程，利用新引入的角参数得到了一个新的能级关系，由此进一步推出了波数和能级的近似公式，并进行了误差分析. 经过与数值结果的对比，我们发现在低能级条件下得到的近似公式，在一般情况下也近似适用.

此外，本文中得到的近似波数与其极限值成比例，比例系数随着势垒高度的增加趋向于1. 这个结果说明了一维无限深势阱中能量公式应用价值，即在有限深势阱情况下，只要满足束缚态存在条件，该能量公式也可以作为粗略的近似来使用.

参考文献:

[1] 周世勋. 量子力学教程[M]. 2版. 北京: 高等教育出版社，2009: 26-42.

[2] 张永德，等. 物理学大题典: 量子力学6[M]. 北京: 科学出版社，2005: 62-67.

[3] 倪致祥. 量子力学教程学习指导[M]. 2版. 北京: 高等教育出版社，2010: 39-71.

An approximate formula of the energy levels in one - dimensional half infinitely high square potential well

HU Zong-yuan

(Safety and Environment Engineering College, Capital University of Economics and Business, Beijing 100070, China)

Abstract: By introducing an angle parameters, we get a new energy - level equation in the one - dimensional half infinitely high square potential well. From this, we obtain an approximate formula of energy levels, and the error is analyzed.

Key words: half infinitely high square potential well; energy levels; approximate formula

冯端院士与全国均教授合著的《凝聚态物理学》(上、下卷)出版

冯端院士与金国均教授合著的《凝聚态物理学》(上、下卷)已于2013年10月由高等教育出版社出版. 笔者有幸参与了该书的部分工作，见证了这部凝聚态领域的史诗巨著诞生的过程，此间万般辛苦，不足一一为外人道，略记载一二.

笔者在南京大学学习时，目睹作者在书稿上反复斟酌、增删和修改，查阅的文献和著作汗牛充栋，付出的心血与汗水汇流成川. 至2006年下卷初具规模，我们都万分期待，当时曾戏语，上卷经历十年才出版，下卷是否也会十年磨一剑. 未曾想一语成谶，作者几易其稿，下卷经历十年才出版.

下卷于2012年交稿，高等教育出版社物理分社集全分社之力，由四位责任编辑通读全书，三位资深编辑作为二审通读全书，这样的阵容在分社历史上也是首次，期间金国均教授还来北京小住几日，与编辑面对面地沟通、修改. 本书所有图也都经历数次修改，线条的粗细和方向都仔细思量，图形的大小和形状都核对原文. 印象最深的是一张石墨管的图片，因原稿效果不理想，我们逐点逐线重新绘制就耗费近两个小时.

二十载的笔耕不辍，若干次的精心磨砺，期待已久的《凝聚态物理学》(上、下卷)终于问世了. 我们衷心希望，这一部凝聚态领域集大成的著作能够帮助更多的读者领略凝聚态物理学浩如烟海的全貌，把握凝聚态物理学纷繁复杂背后的脉络.

(高等教育出版社，缪可可，王硕)

(C)1994-2020 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net